

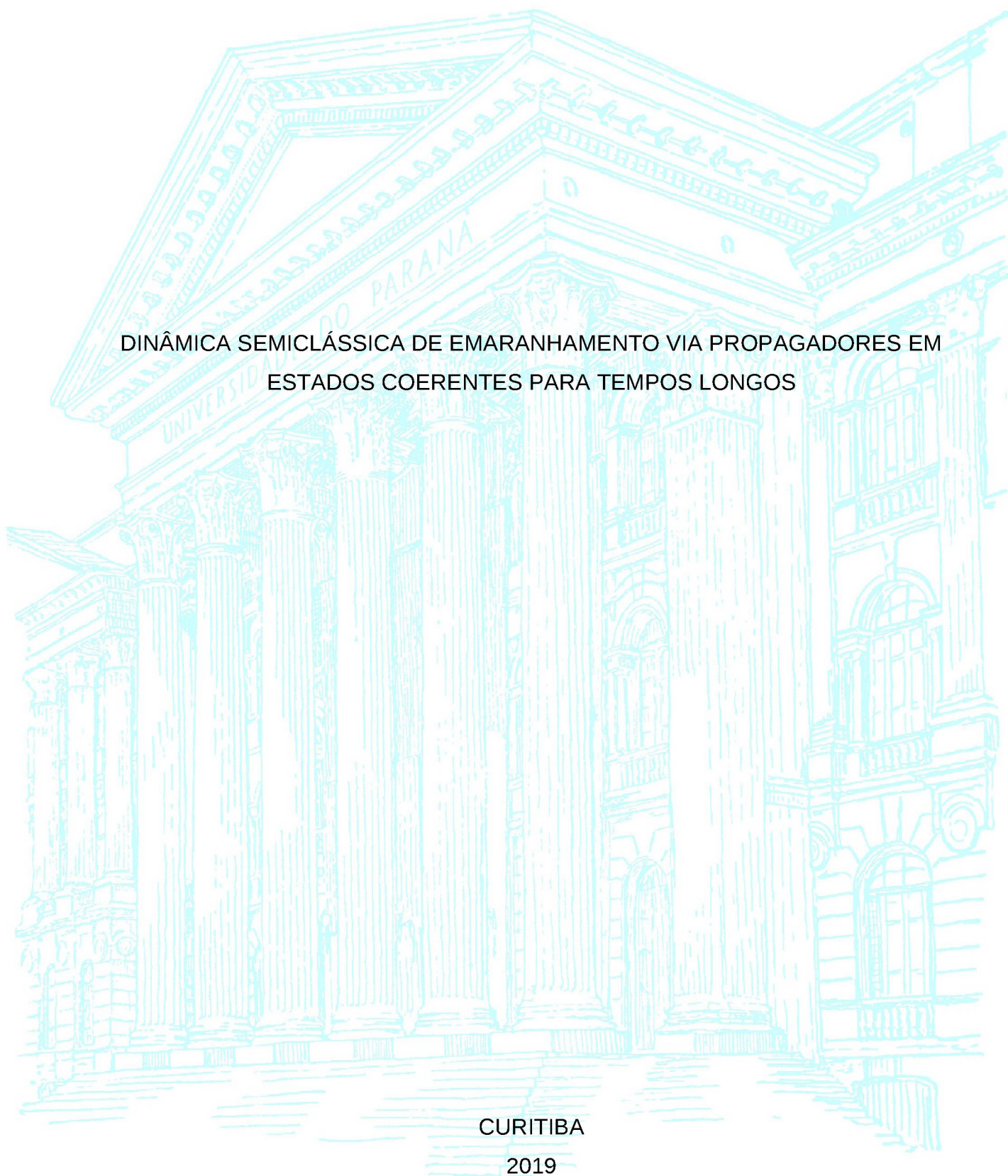
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ARLANS JUAN SMOKOVICZ DE LARA

DINÂMICA SEMICLÁSSICA DE EMARANHAMENTO VIA PROPAGADORES EM
ESTADOS COERENTES PARA TEMPOS LONGOS

CURITIBA

2019



ARLANS JUAN SMOKOVICZ DE LARA

DINÂMICA SEMICLÁSSICA DE EMARANHAMENTO VIA
PROPAGADORES EM ESTADOS COERENTES PARA TEMPOS LONGOS

Dissertação apresentada ao Programa
Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências
Exatas da Universidade Federal do Paraná,
como parte dos requisitos necessários à
obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Dias Ribeiro

CURITIBA

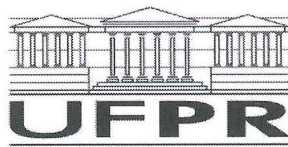
2019

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

- L318d Lara, Arlans Juan Smokovicz de
 Dinâmica semiclássica de emaranhamento via propagadores em
 estados coerentes para tempos longos [recurso eletrônico] / Arlans
 Juan Smokovicz de Lara – Curitiba, 2019.
- Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências
 Exatas, Programa de Pós-graduação em Física.
- Orientador: Prof. Dr. Alexandre Dias Ribeiro
1. Mecânica quântica. 2. Emaranhamento (Física). I.
 Universidade Federal do Paraná. II. Ribeiro, Alexandre Dias. III.
 Título.

CDD: 530.12

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SETOR SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO FÍSICA - 40001016020P4

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **ARLANS JUAN SMOKOVICZ DE LARA** intitulada: "**Dinâmica Semiclássica de Embaralhamento via Propagadores em Estados Coerentes para Tempos Longos**", após terem inquirido o aluno e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua aprovação no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 15 de Março de 2019.

ALEXANDRE DIAS RIBEIRO

Presidente da Banca Examinadora (UFPR)

MARCUS WERNER BEIMS

Avaliador Interno (UFPR)

FABIANO MANOEL DE ANDRADE

Avaliador Externo (UEPG)

Agradecimentos

Meus sinceros agradecimentos envolvem-se:

- Ao Prof. Alexandre, pela orientação e enorme disposição, interesse, confiança, carisma, altruísmo e dedicação comigo.
- Aos meus pais, que me deram tanto apoio durante toda minha vida acadêmica.
- À Jéssica Valente, por iluminar os dias mais negros da minha vida, e me fazer dar o melhor de mim.
- Ao Vítor Almado, meu grande amigo, que sempre esteve ao meu lado e me ajudou nos momentos de tristeza.
- Ao grupo de pesquisa da UFPR, organizado pelo Prof. Renato e Prof. Alexandre, com sábias e delicadas discussões.
- Ao grupo docente do Departamento de Física da UFPR, pelos ensinamentos sobre física, matemática e ciência.
- Aos membros da banca examinadora por aceitar avaliar e colaborar com este manuscrito.
- À fundação CAPES pelo suporte financeiro.

“A maior virtude que eu acho que Deus tem, é a criatividade. Então, eu acho que tem que trabalhar essa criatividade. É deixar a mente aberta, tirar qualquer preconceito racial, de religião, seja o que for. Qualquer preconceito. Se permitir qualquer possibilidade. Tudo. Observar muito. Falar menos. Olhar as coisas que acontecem, as pessoas, o mundo. E ser humilde. Não pense ‘cristalizei, daqui não melhora’. Melhora sim. Ou, até pode ser que você não melhore, mas você se sente bem com isso. Você só precisa ser bom. Você só precisa fazer o bem. Só precisa tratar bem as pessoas. É isso.”

– Guilherme Briggs

RESUMO

O fenômeno do emaranhamento é considerado um efeito puramente quântico. Entretanto, existem na literatura diversas tentativas de descrevê-lo em termos de quantidades clássicas. Em particular, nesta dissertação, estamos interessados na dinâmica de emaranhamento de um sistema descrito por um estado bipartido puro, inicialmente em um produto de estados coerentes, governado por um Hamiltoniano genérico. Para este cenário, a entropia linear do estado reduzido, uma função quantificadora de emaranhamento, pode ser reescrita, para tempos curtos, em termos de trajetórias *reais* da descrição clássica equivalente. Nosso trabalho consiste em mostrar que é possível incluir trajetórias clássicas *complexas* no cálculo, o que pode contribuir para aprimorar aquela aproximação, estendendo sua validade para intervalos de tempo maiores. Além disso, para um Hamiltoniano particular, apresentamos uma primeira aplicação para a fórmula obtida.

Palavras-chave: Aproximação semiclássica. Emaranhamento. Estados coerentes. Propagadores. Trajetórias complexas. Integral de ponto de sela.

ABSTRACT

The entanglement phenomenon is considered as a purely quantum effect. However, there are many attempts to describe it using classical quantities. In particular, in this dissertation, we are interested in the entanglement dynamics of a system described by a pure, bipartite state, initially in a product of coherent states, governed by a generic Hamiltonian. In this scenario, the linear entropy for the reduced state, a function that quantifies entanglement, can be rewritten, for short times, in terms of *real* trajectories of the equivalent classical dynamics. Our work consists in demonstrating that it is possible to include *complex* trajectories in the calculation, which can contribute to improve that approximation, extending its accuracy for longer times. We also show, for a particular Hamiltonian, a first application of the obtained formula.

Keywords: Semiclassical approximation. Entanglement. Coherent states. Propagator. Complex trajectories. Saddle point integral.

Lista de Figuras

2.1	Evolução temporal de z	28
2.2	Ilustração do problema clássico.	29
3.1	Diversos caminhos para a integral de caminho. Imagem retirada de [23].	36
4.1	O caminho C será deformado até o caminho C' que passa pelo ponto de sela z_0 (aqui representado pela origem do plano). As curvas verdes são pontos de <i>aclive</i> e as azuis são as curvas de <i>declive</i> . Mesmo que soubéssemos como realizar a integral em qualquer um dos outros caminhos, o caminho C' é o que mais facilita tal cálculo no limite assintótico de interesse, $\hbar \rightarrow 0$	46
4.2	Ilustração da extensão das variáveis. Em (a), no lugar de calcular a integral em <i>todo</i> o plano complexo z , alteramos este cálculo para duas integrais de linha, percorrendo os caminhos ao longo dos eixos q e p , partes real e imaginária de z , respectivamente, representados pela linha grossa. Em (b), consideramos que q e p podem ser complexos, fato este que nos daria um espaço 4-dimensional, representados pelos dois planos complexos. Dessa forma, os caminhos de integração podem ser deformados, de acordo com o Teorema Integral de Cauchy.	49
6.1	Ilustração das raízes de $f(x_2)$. A linha pontilhada representa $\text{Re}(f(x_2)) = 0$, enquanto a linha tracejada representa $\text{Im}(f(x_2)) = 0$. As raízes, então, são encontradas nos cruzamentos das linhas. Os parâmetros numéricos são: $E_{0r} = \omega_{0r} = \lambda = 1$, $\hbar = \pi/5$ e $z_{0r} = \sqrt{E_{0r}/(\hbar\omega_r)}$. Note o surgimento de um número grande de raízes, à medida que avançamos no tempo.	76
6.2	(a) Parte real das trajetórias realizada por dois pontos x_2 , obtidos através do método de Newton-Raphson. (b) Parte imaginária das trajetórias realizadas pelos mesmos pontos. Ao passar do tempo, ambas as trajetórias ficam muito próximas. Estes são os pontos mais próximos da origem (no semiplano $\text{Im}(x_2) > 0$) que aparecem na fig. 6.1 (b).	78

6.3	Gráfico da pureza exata e da pureza semiclássica utilizando apenas a trajetória trivial. Aqui, utilizamos $ z_{0r} ^2 = E_{0r}/(\hbar\omega_r)$, $E_{0r} = \omega_r = \lambda = 1$, e $\hbar = 0.2\pi$	83
6.4	Análise da validade da expressão $\mathcal{P}_\tau^{\text{triv}} = \frac{1}{\sqrt{y^{\text{triv}}}}$, a tempo curto. Comparamos o erro relativo da pureza semiclássica com o seu resultado quântico equivalente. Podemos ver que, a tempo curto, a diferença é extremamente pequena, aumentando ao passar do tempo.	84
6.5	(a) Pureza exata, pureza trivial, e pureza trivial adicionada de mais contribuições. A curva exata, obtida através da eq. (6.13), mostra que, ao se passar um intervalo de tempo igual ao tempo de recoerência τ_{rec} , ilustrado aqui como $\tau = 1$, a pureza retorna ao seu valor inicial. O resultado obtido para a trajetória trivial, com as correções obtidas até o momento, não consegue reproduzir as oscilações do resultado exato. (b) Ampliação da pureza a tempos curtos. Parâmetros: $ z_{0r} ^2 = E_{0r}/(\hbar\omega_r)$, $E_{0r} = \omega_r = \lambda = 1$, e $\hbar = 0.2\pi$	85
6.6	Curvas de nível de $f(x_2) = 0$, focadas nas raízes próximas à origem. A linha vermelha é o círculo, centrado na origem, de raio unitário.	87
6.7	Pureza exata (azul), pureza semiclássica com apenas a trajetória trivial (laranja), e pureza com as contribuições do círculo unitário (verde). Utilizamos $ z_{0r} ^2 = E_{0r}/(\hbar\omega_r)$, $E_{0r} = \omega_r = \lambda = 1$, e $\hbar = 0.2\pi$	88
6.8	Pureza final. A linha contínua é o resultado exato, a linha tracejada é a pureza apenas com a trajetória trivial, e a linha pontilhada é o resultado com a inclusão de todas as trajetórias discutidas. Podemos ver que o método consegue reproduzir, inclusive, as oscilações da pureza (e, por consequência, da entropia linear).	88

SUMÁRIO

1	Introdução	12
2	Estados Coerentes	15
2.1	Equações Clássicas do Oscilador Harmônico	15
2.2	Condições para definir estados semiclássicos	17
2.3	O estado coerente como um autoestado do operador de aniquilação	19
2.4	Variâncias e incertezas dos estados coerentes	22
2.5	O operador de deslocamento e a função de onda para os estados coerentes .	24
2.6	Completeza	26
2.7	Evolução temporal dos estados coerentes	27
2.8	Movimento do pacote de onda e aplicação para o oscilador clássico	29
2.9	Estados coerentes bidimensionais e a generalização para um espaço n - dimensional	30
3	Integrais de caminho	33
3.1	O Propagador Quântico	33
3.2	Propagador como uma amplitude de transição	34
3.3	Integrais de caminho	35
3.4	Formulação de Feynman	37
4	A aproximação semiclássica do propagador em estados coerentes	41
4.1	O propagador em estados coerentes	41
4.2	A integral de ponto de sela ou método dos declives mais íngremes	44
4.3	Trajetoárias clássicas estendidas para o plano complexo	48
4.3.1	Extensão das variáveis	48
4.3.2	Trajetoória crítica e limite contínuo	48
4.4	Vizinhança da trajetória clássica complexa	50

4.5	Ação complexa	52
4.6	Fórmula para o propagador semiclássico	52
4.7	Retro-propagador semiclássico em estados coerentes	54
5	Emaranhamento e entropia linear semiclássica	56
5.1	Quantificando emaranhamento	56
5.2	Fórmula semiclássica da pureza	58
5.3	Fórmula semiclássica da pureza revisitada	62
6	Aplicação: osciladores harmônicos acoplados	66
6.1	Cálculo quântico exato	67
6.2	Cálculo das trajetórias para o sistema estudado	70
6.3	Análise das trajetórias	72
6.4	Resolvendo a equação transcendental	75
6.4.1	Método de Newton-Raphson	76
6.5	Pureza semiclássica	79
6.5.1	Trajeto�rias reais	81
6.5.2	Trajeto�rias complexas	83
6.5.3	An�lise no �rculo unit�rio	86
7	Coment�rios finais	89
	Refer�ncias	91

Capítulo 1

Introdução

A nossa percepção clássica do mundo, que provém do fato de sermos objetos macroscópicos, sempre nos levou a interpretar a natureza com tal visão. Mesmo não sendo perfeita, por séculos foi tal interpretação que auxiliou a humanidade a evoluir, tanto socialmente como científica e tecnologicamente. Com o surgimento do eletromagnetismo no séc. XIX, e mais tarde, da mecânica quântica e da relatividade no séc. XX, questões nas quais a mecânica clássica não obtinha resultados que concordavam com os experimentos puderam ser respondidas com essas novas teorias físicas.

Porém, a mecânica clássica apresenta resultados, ainda muito bons no seu domínio de validade, que continuam sendo importantes para diversas áreas, como, por exemplo, no estudo da sincronização de redes neurais [1, 2], e aproximações semiclássicas, as quais trataremos neste trabalho, que tratam da descrição de fenômenos quânticos, através de formalismos que utilizam mecanismos clássicos [3, 4].

O estudo do emaranhamento, que intrigou, e ainda intriga, a comunidade científica, vem sendo utilizado para processamento de informação quântica, computação quântica, teleporte, e criptografia quântica [5, 6]. Tal propriedade física vem sendo reconhecida, assim como sua importância, em diversos problemas relacionados à fundamentação da mecânica quântica, como, por exemplo, nas implicações do problema da medição, e no entendimento da discussão dos aspectos não-locais da natureza, iniciada no trabalho de Einstein, Podolsky e Rosen [7].

Existem diversas tentativas de se estudar, interpretar, e associar o emaranhamento e sua dinâmica com quantidades clássicas, mesmo este sendo considerado um fenômeno puramente quântico. É possível mostrar que, no regime de tempo curto, a dinâmica de

emaranhamento pode ser muito bem aproximada por abordagens baseadas no formalismo clássico de Liouville [8–11].

Ao observar estes estudos, há indícios para suspeitar que a dinâmica mencionada acima é gerada, inicialmente, por mecanismos com análogos clássicos bem definidos. Achar tais mecanismos foi o foco do trabalho [12], através de um caminho diferente do usualmente encontrado na literatura até então: ao invés de trabalhar com teorias estatísticas puramente clássicas, foram utilizados métodos baseados em propagadores semiclássicos. Além disso, ao contrário, por exemplo, dos trabalhos [13, 14], que utilizam o propagador semiclássico de Van Vleck [15], um propagador unidimensional na representação das posições, o artigo [12] utiliza o propagador em estados coerentes. Neste trabalho, os autores apresentam um formalismo que envolve propagadores e *retro-propagadores*, significando propagadores que evoluem positivamente e negativamente no tempo, respectivamente. Assim, ao calcular uma medida de emaranhamento, como a entropia linear, utilizada no trabalho, pode-se realizar uma aproximação semiclássica envolvendo tais objetos para quantificar esta propriedade física. Como resultado, os autores concluem que trajetórias *reais* da descrição clássica equivalente contribuem para o cálculo da entropia linear.

A primeira contribuição desta dissertação é uma extensão do trabalho [12]. Nós nos utilizamos desta aproximação semiclássica, baseada nos propagadores e retro-propagadores semiclássicos para incluir, além da trajetória real clássica descrita no artigo [12], trajetórias *complexas*, obtidas através de uma extensão analítica do espaço de fase. Veremos que a conclusão de que as trajetórias envolvidas no cálculo da entropia linear são reais é um caso muito particular. Mais especificamente, conjuntos de quatro trajetórias complexas são os ingredientes para a nossa abordagem. Curiosamente, ao fazer esta extensão analítica das variáveis, as componentes das trajetórias passam a estar “emaranhadas entre si”, com seus valores finais se relacionando de uma maneira não-trivial, através de tais condições de contorno, como veremos ao descrever o método semiclássico que utilizamos. Dessa maneira, em princípio, esperamos que incluir tais trajetórias nos permita obter um resultado semiclássico que se assemelha mais ao quântico. A segunda contribuição é uma aplicação do nosso método para um Hamiltoniano específico. Mostramos o resultado quântico exato para a pureza, que já é conhecido, para assim comparar com nossa aproximação. Primeiro, consideramos o mesmo argumento de [12], utilizando trajetórias reais, para depois adicionar as contribuições das trajetórias complexas.

Esta dissertação de Mestrado está composta da seguinte maneira: no capítulo 2, estudamos, de uma maneira que acreditamos ser bastante natural, os *estados coerentes*, uma das principais ferramentas para a análise semiclássica de propagadores descrita em [16], assim como sua generalização para várias dimensões. No capítulo 3, introduzimos o conceito de *integrais de caminho* e de propagadores na base de posição, seguindo um caminho semelhante com o qual Feynman obteve seus resultados. Reforçamos aqui, e também no texto, que não estamos dizendo que esta é uma *dedução* do formalismo de integrais de caminho, mas sim uma ideia geral sobre o assunto, com algumas equações para ilustrar o passo-a-passo. Para um leitor mais experiente, entendemos que a leitura do capítulo 3 não é essencial para a compreensão dos assuntos tratados posteriormente.

No capítulo 4, damos foco aos métodos que levam à aproximação semiclássica de nosso interesse. As integrais que aparecem nas expressões para os propagadores, que agora iremos escrever em termos da base em estados coerentes, descrita no capítulo 2, serão calculadas via *método do ponto de sela*. Introduziremos, também, um dos principais pontos que utilizamos neste trabalho, que é a extensão analítica das variáveis para o espaço complexo. Sua importância será vista no decorrer do texto. Mostramos como a ação, agora complexa, é escrita. Por fim, apresentamos um resumo dos resultados e a fórmula do propagador semiclássico, assim como uma expressão para o retro-propagador semiclássico.

O capítulo 5 oferece uma leitura rápida sobre o emaranhamento, mostrando também uma das maneiras de se quantificar esta propriedade: a entropia linear do estado reduzido. Além disso, utilizando os resultados do capítulo 4, deduzimos a fórmula semiclássica para a pureza do estado reduzido, quantidade diretamente relacionada à entropia linear. Nesse capítulo, inclui-se nossa primeira contribuição para o trabalho: mostraremos como incluir trajetórias complexas na descrição de emaranhamento. Com todo o formalismo apresentado, realizamos sua aplicação para um Hamiltoniano particular no capítulo 6. Aqui, apresentaremos toda a análise realizada, desde o resultado quântico exato, até os resultados semiclássicos que obtivemos. E, por fim, no capítulo 7, faremos os últimos comentários sobre nossos resultados, e apresentaremos perspectivas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Estados Coerentes

Um ponto importante no estudo de aproximações semiclássicas são os estados coerentes do oscilador harmônico. Tais estados foram estudados por Erwin Schrödinger em 1926 [17], ao procurar, na mecânica quântica, quais estados são os mais próximos de “pontos quânticos”¹. Veremos como obter tais estados no decorrer deste capítulo, e um teste de consistência para o próprio Hamiltoniano do oscilador harmônico simples. Estudaremos suas incertezas em energia, posição e *momentum*, e a descrição do pacote de onda do estado coerente, onde mostraremos que tal estado apenas translada no espaço de fases, sem deformar. Em outras palavras, se mantendo *coerente*.

2.1 Equações Clássicas do Oscilador Harmônico

Utilizando o formalismo de Hamilton, onde a função Hamiltoniana para o oscilador harmônico simples (unidimensional) é dada por $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$, em que p é o *momentum* canonicamente conjugado à posição q , podemos obter as equações de movimento, que são dadas por [18, 19]

$$\begin{aligned}\frac{dq}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{1}{m}p, \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2 q.\end{aligned}\tag{2.1}$$

¹Não confundir com *quantum dots*, que também significa pontos quânticos, numa tradução livre, porém, tratando-se de estrutura semicondutoras muito pequenas, da ordem de nanômetros. Nesta dissertação, a ideia de “ponto quântico” é geométrica; refere-se ao estado quântico representado, no espaço de fases, por uma estrutura geométrica que mais se aproxima de um ponto, respeitando o Princípio de Incerteza de Heisenberg.

Por conveniência, vamos introduzir as variáveis adimensionais q e p ,

$$\begin{aligned} q &= \frac{q}{b}, \\ p &= \frac{p}{c}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

com $b = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ e $c = \sqrt{\hbar m\omega}$. Note que $bc = \hbar$. Assim, podemos reescrever as equações de movimento para as variáveis adimensionais como

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \frac{1}{b} \frac{dq}{dt} = \frac{1}{b} \frac{p}{m} = \frac{1}{b} \frac{cp}{m} = \omega p, \\ \frac{dp}{dt} &= \frac{1}{c} \frac{dp}{dt} = -\frac{1}{c} m\omega^2 q = -m\omega^2 \frac{b}{c} q = -\omega q. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Vamos definir agora uma nova variável, z , dependente do tempo, que se relaciona a q e p da seguinte maneira:

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} (q + ip). \quad (2.4)$$

Calculando sua variação temporal, obtemos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dt} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{dq}{dt} + i \frac{dp}{dt} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\omega p - i\omega q) \\ &= \frac{1}{i\sqrt{2}} (i\omega p + \omega q) \\ &= -i\omega \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (q + ip) \right), \end{aligned} \quad (2.5)$$

o que nos dá, então,

$$\frac{dz}{dt} = -i\omega z. \quad (2.6)$$

A solução desta equação diferencial é simples, dada por

$$z = z_0 \exp(-i\omega t), \quad (2.7)$$

onde $z_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_0 + ip_0)$, com o subíndice indicando $t = 0$. Podemos também calcular o complexo conjugado de z , nos permitindo então escrever x e p em termos dessas novas funções,

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{\sqrt{2}} (z_0 \exp(-i\omega t) + z_0^* \exp(+i\omega t)), \\ p &= -\frac{i}{\sqrt{2}} (z_0 \exp(-i\omega t) - z_0^* \exp(+i\omega t)). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Também podemos escrever a expressão para a energia clássica do oscilador em termos de z e z^* ,

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 = \frac{1}{2m}p_0^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q_0^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (q_0^2 + p_0^2) = \hbar\omega |z_0|^2 = \text{cte.} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Então, $|z_0|^2$ está relacionado com a razão entre a energia clássica H e a escala de energia definida por $\hbar\omega$. Ao escrever a energia clássica desta maneira, a comparação com o valor esperado do Hamiltoniano, assim como o que caracteriza uma energia “clássica”, ficará mais clara, como veremos a seguir.

2.2 Condições para definir estados semiclássicos

O que seria o análogo quântico (ou pelo menos algo que poderíamos interpretar como) de um ponto no espaço de fases na mecânica clássica? Como, na interpretação usual da mecânica quântica, a imprecisão vinda do Princípio da Incerteza de Heisenberg é inerente à natureza (por mais que existam outras interpretações que tentem desviar dessa forte premissa [20,21]), não é estranho então pensar em “pontos quânticos” como sendo estados cujas variâncias dos operadores Q e P (posição e *momentum*, respectivamente) sejam as menores possíveis. Além disso, para fortalecer a analogia com a descrição clássica, os valores esperados dos operadores Q , P e \mathcal{H} (energia) devem se aproximar dos valores q , p e H do movimento clássico.

Para isso, vamos começar lembrando das expressões para os operadores de *criação* e *aniquilação* do oscilador harmônico, que já são bem conhecidas na literatura [22,23],

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P}) \quad \text{e} \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P}), \quad (2.10)$$

onde \hat{Q} e \hat{P} são operadores adimensionais obtidos analogamente às variáveis adimensionais apresentadas anteriormente nas eqs. (2.2): $\hat{Q} = Q/b$ e $\hat{P} = P/c$. Com isso, podemos então escrever o Hamiltoniano do oscilador harmônico como

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2Q^2 = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (2.11)$$

Na interpretação de Schrödinger, dado um estado $|\psi(t)\rangle = \exp(-i\mathcal{H}t/\hbar) |\psi(0)\rangle$, o valor esperado de um operador qualquer A é dado por $\langle A \rangle_t = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$, onde o subscrito denota que esse valor pode variar no tempo [22,23]. Aqui, ao invés de utilizarmos a

interpretação de Schrödinger, utilizaremos a de Heisenberg, onde o estado é fixo no tempo, e a evolução temporal é incluída no operador. O estado nesta representação é dado simplesmente por $|\psi(0)\rangle$ (o estado inicial na representação de Schrödinger), e o operador é dado por $A_H = \exp(+i\mathcal{H}t/\hbar)A\exp(-i\mathcal{H}t/\hbar)$. A equação de Heisenberg [22, 23] governa a dinâmica associada a operadores e, para o caso de Hamiltonianos que não dependem explicitamente do tempo, vale (omitimos o subscrito H, uma vez que a evolução temporal do operador só se dá na representação de Heisenberg):

$$i\hbar \frac{d}{dt}A = [A, \mathcal{H}]. \quad (2.12)$$

Como estamos escrevendo os operadores de interesse \hat{Q} e \hat{P} em termos dos operadores de criação e aniquilação, é interessante calcular a evolução destes operadores. Para o aniquilação,

$$i\hbar \frac{d}{dt}a = [a, \mathcal{H}] = \left[a, \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \right] = \hbar\omega a, \quad (2.13)$$

onde utilizamos as relações de comutação para a e a^\dagger :

$$[a, a^\dagger] = \mathbb{1}. \quad (2.14)$$

Da mesma maneira, para a^\dagger ,

$$i\hbar \frac{d}{dt}a^\dagger = -\hbar\omega a^\dagger. \quad (2.15)$$

A forma dessas equações diferenciais indica que as soluções são do tipo

$$\begin{cases} a &= a_0 \exp(-i\omega t) \\ a^\dagger &= a_0^\dagger \exp(-i\omega t) \end{cases} \implies \begin{cases} \langle a \rangle &= \langle a \rangle_0 \exp(-i\omega t) \\ \langle a^\dagger \rangle &= \langle a^\dagger \rangle_0 \exp(+i\omega t) = \langle a \rangle_0^* \exp(+i\omega t) \end{cases}, \quad (2.16)$$

onde o subíndice representa $t = 0$. Estas expressões são muito semelhantes (de fato, análogas) às equações para z e z^* , como indica a eq. (2.7). Substituindo em \hat{Q} e \hat{P} ,

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle &= +\frac{1}{\sqrt{2}} [\langle a \rangle_0 \exp(-i\omega t) + \langle a \rangle_0^* \exp(+i\omega t)] \quad \text{e} \\ \langle \hat{P} \rangle &= -\frac{i}{\sqrt{2}} [\langle a \rangle_0 \exp(-i\omega t) - \langle a \rangle_0^* \exp(+i\omega t)], \end{aligned} \quad (2.17)$$

que são muito semelhantes às equações para x e p , eqs. (2.8). Se, como dito no início da subseção, quisermos que os valores esperados dos operadores \hat{Q} e \hat{P} sejam iguais aos valores do sistema análogo clássico, basta procurarmos estados $|\psi(0)\rangle$ que satisfaçam

$$\langle a \rangle_0 = \langle \psi(0) | a | \psi(0) \rangle = z_0. \quad (2.18)$$

Em relação à energia, o valor esperado é uma constante. É fácil de ver isso, pois, para o operador \mathcal{H} , o lado direito da eq. (2.12) se anula (o Hamiltoniano comuta consigo mesmo), o que indica que \mathcal{H} é constante no tempo, assim como seu valor esperado $\langle \mathcal{H} \rangle$. Portanto, ao calcular seu valor inicial $\langle \mathcal{H} \rangle_0$, obtemos:

$$\langle \mathcal{H} \rangle_0 = \hbar\omega \left(\langle a^\dagger a \rangle_0 + \frac{1}{2} \right). \quad (2.19)$$

As energias geralmente encontradas nos sistemas clássicos (em especial, de osciladores harmônicos) possuem ordem de grandeza muito maior que a de $\hbar\omega$. Desta maneira, nessa descrição de estados semiclássicos, iremos desprezar o termo $\hbar\omega/2$ no valor esperado da energia, obtendo assim,

$$\langle \mathcal{H} \rangle_0 \simeq \hbar\omega \langle a^\dagger a \rangle_0. \quad (2.20)$$

Se quisermos que este valor esperado seja igual à energia clássica, devemos trabalhar com estados que satisfaçam $\langle a^\dagger a \rangle_0 = |z_0|^2$, como indica a eq. (2.9). Note que, procedendo desta maneira, estamos implicitamente assumindo que $|z_0|^2 \gg 1$, que, como mostrado na eq. (2.9), relaciona a energia do sistema clássico com o valor de energia $\hbar\omega$. Assim, fazer $|z_0|^2 \gg 1$ implica em energias consideradas “clássicas”. Recuperando os resultados aqui obtidos, conclui-se que os “pontos quânticos” que procuramos são os estados $|\psi(0)\rangle$ que satisfazem a eq. (2.18), com $|z_0| \gg 1$.

2.3 O estado coerente como um autoestado do operador de aniquilação

Ao considerarmos um estado $|\psi(0)\rangle$ cujos valores esperados satisfazem todas as condições discutidas anteriormente, estaremos próximos de encontrar uma expressão para os estados de nosso interesse. Duas questões importantes que ainda não foram respondidas são: como escrever uma expressão para esse estado, e como ficaria a sua expansão em termos de autoestados do oscilador harmônico?

Para responder essas perguntas, vamos primeiro definir um operador $d(z_0) = a - z_0$, com adjunto $d^\dagger(z_0) = a^\dagger - z_0^*$. Vamos calcular o valor esperado (no tempo $t = 0$) do

operador $d^\dagger d$:

$$\begin{aligned}\langle \psi(0) | d^\dagger d | \psi(0) \rangle &= \langle \psi(0) | (a^\dagger - z_0^*)(a - z_0) | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | a^\dagger a | \psi(0) \rangle - z_0 \langle \psi(0) | a^\dagger | \psi(0) \rangle \\ &\quad - z_0^* \langle \psi(0) | a | \psi(0) \rangle + z_0^* z_0 \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle.\end{aligned}$$

Na discussão da subseção anterior, já vimos que, no caso do estado em questão, $\langle \psi(0) | a | \psi(0) \rangle = (\langle \psi(0) | a^\dagger | \psi(0) \rangle)^* = z_0$ e $\langle a^\dagger a \rangle_0 = |z_0|^2$. Portanto,

$$\langle \psi(0) | d^\dagger d | \psi(0) \rangle = |z_0|^2 - |z_0|^2 - |z_0|^2 + |z_0|^2 = 0. \quad (2.21)$$

Podemos entender esse resultado da seguinte maneira: considere um estado $|\phi\rangle = d|\psi(0)\rangle$. Seu módulo quadrado será então $|\langle \phi | \phi \rangle|^2 = \langle \psi(0) | d^\dagger d | \psi(0) \rangle = 0$. Como o módulo quadrado é um valor maior ou igual a zero, e a igualdade dá-se apenas quando o estado é o vetor nulo, então o estado $|\phi\rangle$ é o vetor nulo:

$$|\phi\rangle = d|\psi(0)\rangle = (a - z_0)|\psi(0)\rangle = |0\rangle,$$

o que implica

$$a|\psi(0)\rangle = z_0|\psi(0)\rangle + |0\rangle = z_0|\psi(0)\rangle, \quad (2.22)$$

onde utilizamos a definição do vetor nulo, $|A\rangle + |0\rangle = |A\rangle$. Isso nos diz que o estado que estamos procurando, que daqui em diante chamaremos de *estado coerente*, é um *autoestado* (mais especificamente, um *autoket*) do operador de aniquilação, com autovalor z_0 . É importante notar que, devido ao fato de a não ser Hermitiano, ele não possui um *autobra* da forma $(|\psi(0)\rangle)^\dagger$. A partir de agora, usaremos a notação

$$a|z\rangle = z|z\rangle, \quad (2.23)$$

sendo $z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} + i \frac{p}{c} \right)$ o autovalor do operador a associado ao estado $|z\rangle$. A relação para z em termos da posição q e *momentum* p vem da eq. (2.10). Com esse resultado em mãos, podemos então escrever uma expansão na base de número (ou seja, na base de autoestados do operador número $N = a^\dagger a$, com $N|n\rangle = n|n\rangle$):

$$\begin{aligned}|z\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(z) |n\rangle \\ \implies a|z\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(z) a|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(z) \sqrt{n} |n-1\rangle.\end{aligned}$$

Fazendo $n \rightarrow n + 1$ no último somatório, e utilizando o fato de que $|z\rangle$ é um autoestado de a ,

$$a|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1}(z) \sqrt{n+1} |n\rangle = z|z\rangle = z \sum_{n=0}^{\infty} c_n(z) |n\rangle.$$

O último somatório vem da própria expressão para o estado coerente na base $|n\rangle$. Como os diferentes $|n\rangle$ são ortonormais entre si, podemos multiplicar, na expressão acima, pela esquerda, um estado $\langle n'|$, nos permitindo concluir que

$$c_{n+1}(z) = \frac{z c_n(z)}{\sqrt{n+1}}. \quad (2.24)$$

Além disso, notamos que podemos obter uma relação de recorrência utilizando a equação acima, implicando que os diferentes $c_n(z)$ podem ser obtidos em função de $c_0(z)$:

$$c_n(z) = \frac{z^n c_0(z)}{\sqrt{n!}}. \quad (2.25)$$

Logo, ao definir $c_0(z)$, fixamos *todos* os $c_n(z)$, e o estado fica definido. Uma maneira conveniente de determinar $c_0(z)$ é através da normalização de $|z\rangle$,

$$\langle z|z\rangle = \left(\sum_m \langle m| c_m^* \right) \left(\sum_n c_n |n\rangle \right) = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m|n\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \delta_{n,m} = \sum_n |c_n|^2 = 1,$$

então

$$\sum_n |c_n|^2 = \sum_n \left| \frac{z^n c_0}{\sqrt{n!}} \right|^2 = |c_0|^2 \sum_n \frac{|z|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 \sum_n \frac{(|z|^2)^n}{n!}.$$

O somatório é exatamente igual à expansão de Taylor de $\exp(|z|^2)$, e temos então:

$$|c_0|^2 \exp(|z|^2) = 1 \Rightarrow |c_0|^2 = \exp(-|z|^2).$$

Como essa escolha é arbitrária, por conveniência, vamos escolher $c_0(z) \in \mathbb{R}$ e $c_0(z) > 0$, então, obtemos

$$\sqrt{|c_0|^2} = c_0 = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right). \quad (2.26)$$

Inserindo esse resultado na expansão de $|z\rangle$,

$$|z\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \frac{z c_0}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2.27)$$

2.4 Variâncias e incertezas dos estados coerentes

Até agora, tratamos apenas os valores esperados de \mathcal{H} , \hat{Q} e \hat{P} , verificando que, fazendo uma escolha conveniente de estados quânticos, eles se igualam aos valores clássicos H , q e p . Porém, ainda não tratamos das incertezas nesses valores. De nada adianta para a descrição de um “ponto quântico” se tais valores flutuarem imensamente. Logo, esta subseção estará voltada a analisar essas variações.

O desvio quadrático médio de um operador A é dada pela expressão

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (2.28)$$

Precisamos, portanto, calcular o valor esperado de A^2 e subtrair o quadrado da média de A , que, para os operadores que estamos interessados, já estão calculadas. Para o Hamiltoniano do oscilador harmônico,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^2 &= \hbar^2 \omega^2 \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \\ &= \hbar^2 \omega^2 \left(a^\dagger a a^\dagger a + \frac{1}{2} a^\dagger a + \frac{1}{2} a^\dagger a + \frac{1}{4} \right). \end{aligned}$$

Lembrando que a e a^\dagger satisfazem a relação de comutação, eq. (2.14), teremos

$$a a^\dagger = \mathbb{1} + a^\dagger a,$$

que nos leva a

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^2 &= \hbar^2 \omega^2 \left(a^\dagger (\mathbb{1} + a^\dagger a) a + \frac{1}{2} a^\dagger a + \frac{1}{2} a^\dagger a + \frac{1}{4} \right) \\ &= \hbar^2 \omega^2 \left(2 a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger a a + \frac{1}{4} \right). \end{aligned}$$

Ao calcular o valor esperado de \mathcal{H}^2 em relação a $|z\rangle$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H}^2 \rangle_z &= \langle z | \hbar^2 \omega^2 \left(2 a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger a a + \frac{1}{4} \right) | z \rangle \\ &= \hbar^2 \omega^2 \left(2 |z|^2 + \frac{1}{4} + \langle z | a^\dagger a^\dagger a a | z \rangle \right). \end{aligned}$$

Para calcular $\langle z | a^\dagger a^\dagger a a | z \rangle$, usamos o fato de que, se $|z\rangle$ é um *autoket* de a com autovalor z , então $\langle z |$ é um *autobra* de a^\dagger , com autovalor associado z^* . Podemos então aplicar a em $|z\rangle$ e a^\dagger em $\langle z |$ (por isso escrevemos o Hamiltoniano com todos os operadores a^\dagger à esquerda e os operadores a à direita: a facilidade de atuação dos operadores a e a^\dagger nos estados coerentes), obtendo então

$$\langle z | a^\dagger a^\dagger a a | z \rangle = |z|^4,$$

e portanto

$$\langle \mathcal{H}^2 \rangle_z = \hbar^2 \omega^2 \left(|z|^4 + 2|z|^2 + \frac{1}{4} \right). \quad (2.29)$$

Por conveniência, não desprezaremos neste cálculo o termo $\hbar\omega/2$ do Hamiltoniano como fizemos na eq. (2.20). Isso nos permitirá escrever

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_z &= \hbar\omega \left(|z|^2 + \frac{1}{2} \right) \\ \implies \langle \mathcal{H} \rangle_z^2 &= \hbar^2 \omega^2 \left(|z|^4 + |z|^2 + \frac{1}{4} \right), \end{aligned}$$

o que nos dá, finalmente,

$$\Delta \mathcal{H}_z = \sqrt{\hbar^2 \omega^2 \left(|z|^4 + 2|z|^2 + \frac{1}{4} \right) - \hbar^2 \omega^2 \left(|z|^4 + |z|^2 + \frac{1}{4} \right)} = \hbar\omega |z|. \quad (2.30)$$

Comparando o valor médio com o desvio quadrático médio,

$$\frac{\Delta \mathcal{H}_z}{\langle \mathcal{H} \rangle_z} \simeq \frac{\hbar\omega |z|}{\hbar\omega |z|^2} = \frac{1}{|z|}, \quad (2.31)$$

que nos diz que a energia relativa do estado $|z\rangle$ é bem definida, sempre que $|z| \gg 1$, o que está de acordo com a ideia de um estado cuja descrição quântica é próxima a de um sistema clássico, como gostaríamos que fosse.

De maneira análoga, vamos calcular ΔQ e ΔP (para os operadores dimensionalizados):

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_z &= \frac{b}{\sqrt{2}} \langle z | (a^\dagger + a) | z \rangle = \frac{b}{\sqrt{2}} (z^* + z) = b\sqrt{2} \operatorname{Re}(z); \\ \langle P \rangle_z &= \frac{ic}{\sqrt{2}} \langle z | (a^\dagger - a) | z \rangle = \frac{ic}{\sqrt{2}} (z^* - z) = ic\sqrt{2} \operatorname{Im}(z); \\ \langle Q^2 \rangle_z &= \left(\frac{b}{\sqrt{2}} \right)^2 (1 + (z + z^*)^2); \\ \langle P^2 \rangle_z &= \left(\frac{c}{\sqrt{2}} \right)^2 (1 - (z - z^*)^2). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Então,

$$\begin{aligned} \Delta Q &= \sqrt{\left(\frac{b}{\sqrt{2}} \right)^2 (1 + (z + z^*)^2) - \left(\frac{b}{\sqrt{2}} (z^* + z) \right)^2} = \frac{b}{\sqrt{2}}; \\ \Delta P &= \sqrt{\left(\frac{c}{\sqrt{2}} \right)^2 (1 - (z - z^*)^2) - \left(\frac{c}{\sqrt{2}} (z^* - z) \right)^2} = \frac{c}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

que indica que, uma vez que b e c estejam fixos, as incertezas na posição e no *momentum* também estão. A relação de incerteza se escreve então

$$\Delta Q \Delta P = \frac{bc}{2} = \frac{\hbar}{2}, \quad (2.34)$$

que é mínima, como queríamos ao construir os estados coerentes.

2.5 O operador de deslocamento e a função de onda para os estados coerentes

Uma maneira simples de obter as funções de onda para os estados coerentes é através da utilização de um operador $D(z)$ definido como

$$D(z) = \exp(z a^\dagger - z^* a), \quad (2.35)$$

que é chamado de *operador de deslocamento* na literatura [22, 23], o motivo veremos a seguir. Este é um operador unitário, e seu adjunto hermitiano é dado por $D^\dagger(z) = \exp(z^* a - z a^\dagger) = D^{-1}(z)$. Para ficar mais simples sua aplicação, podemos utilizar a fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff: dados dois operadores A e B , que não necessariamente comutam entre si, mas que comutam com seu comutador (ou seja, $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$), vale [23]:

$$\exp(A + B) = \exp(A) \exp(B) \exp\left(-\frac{1}{2} [A, B]\right). \quad (2.36)$$

Chamando $A = z a^\dagger$ e $B = -z^* a$, seu comutador será $[A, B] = -z z^* a^\dagger a + z z^* a a^\dagger = z z^* [a, a^\dagger] = z z^*$ (que é um número, mais especificamente um número multiplicando o operador identidade, o qual comuta com a e a^\dagger , satisfazendo assim a condição para a fórmula citada), o que nos dá

$$D(z) = \exp(z a^\dagger - z^* a) = \exp\left(-\frac{1}{2} |z|^2\right) \exp(z a^\dagger) \exp(-z^* a). \quad (2.37)$$

Agora, podemos aplicar este operador no estado fundamental do oscilador harmônico, denotado por $|0\rangle$. Para isso, note que, na aplicação de $\exp(-z^* a)$, obtemos o próprio estado fundamental:

$$\exp(-z^* a) |0\rangle = \left(1 - z^* a + \frac{(z^* a)^2}{2} + \dots\right) |0\rangle = |0\rangle,$$

pois o operador de aniquilação, atuando no estado fundamental, nos dá o *ket* nulo. Da mesma maneira, atuando com o termo $\exp(z a^\dagger)$,

$$\exp(z a^\dagger) |0\rangle = \sum_n \frac{(z a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = \sum_n \frac{z^n}{n!} \sqrt{n!} |n\rangle = \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,$$

e portanto,

$$D(z) |0\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = |z\rangle, \quad (2.38)$$

o que nos diz que o operador $D(z)$ é a transformação que leva o estado fundamental do oscilador harmônico ao estado coerente $|z\rangle$ (ou seja, ele desloca o estado fundamental, de energia $\hbar\omega/2$, representado pela origem do plano complexo z , ao estado coerente, de energia $\hbar\omega(|z|^2 + 1/2)$).

Para calcular a função de onda $\psi(x) = \langle x|z\rangle = \langle x|D(z)|0\rangle$, é mais fácil escrever o operador de deslocamento em termos dos operadores de posição e *momentum*, Q e P . O expoente de $D(z)$ se torna, então:

$$\begin{aligned} za^\dagger - z^*a &= \frac{z}{\sqrt{2}} \left(\frac{Q}{b} - \frac{iP}{c} \right) - \frac{z^*}{\sqrt{2}} \left(\frac{Q}{b} + \frac{iP}{c} \right) \\ &= \frac{1}{b} \left(\frac{z - z^*}{\sqrt{2}} \right) Q - \frac{i}{c} \left(\frac{z + z^*}{\sqrt{2}} \right) P. \end{aligned}$$

Chamando $A = \frac{1}{b} \left(\frac{z - z^*}{\sqrt{2}} \right) Q$ e $B = -\frac{i}{c} \left(\frac{z + z^*}{\sqrt{2}} \right) P$, podemos utilizar novamente a eq. (2.36), ao calcularmos que o comutador entre A e B é

$$\begin{aligned} [A, B] &= -\frac{1}{b} \left(\frac{z - z^*}{\sqrt{2}} \right) Q \frac{i}{c} \left(\frac{z + z^*}{\sqrt{2}} \right) P + \frac{i}{c} \left(\frac{z + z^*}{\sqrt{2}} \right) P \frac{1}{b} \left(\frac{z - z^*}{\sqrt{2}} \right) Q \\ &= -\frac{i}{2\hbar} (z^2 - z^{*2}) [Q, P] \\ &= \frac{1}{2} (z^2 - z^{*2}), \end{aligned}$$

onde usamos $[Q, P] = i\hbar$ [22, 23]. Portanto, teremos, para o operador de descolamento,

$$\exp(za^\dagger - z^*a) = \exp\left(\frac{1}{b} \left(\frac{z - z^*}{\sqrt{2}} \right) Q\right) \exp\left(-\frac{i}{c} \left(\frac{z + z^*}{\sqrt{2}} \right) P\right) \exp\left(\frac{1}{4}(z^{*2} - z^2)\right). \quad (2.39)$$

Com isso, temos

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \underbrace{\langle q | \exp\left(\frac{1}{b} \left(\frac{z - z^*}{\sqrt{2}} \right) Q\right)}_{\langle q | \text{ é autobra de } Q} \exp\left(-\frac{i}{c} \left(\frac{z + z^*}{\sqrt{2}} \right) P\right) \underbrace{\exp\left(\frac{1}{4}(z^{*2} - z^2)\right)}_{\text{apenas um número}} |0\rangle \\ &= \exp\left(\frac{1}{4}(z^{*2} - z^2)\right) \exp\left(\frac{1}{b} \left(\frac{z - z^*}{\sqrt{2}} \right) q\right) \langle q | \exp\left(-\frac{i}{c} \left(\frac{z + z^*}{\sqrt{2}} \right) P\right) |0\rangle. \end{aligned}$$

O resultado dessa expressão é fácil de se obter se nos utilizarmos do operador de translação, $\exp(-i\lambda P/\hbar) |q\rangle = |q + \lambda\rangle$ [22]. Chamando $\lambda = -\hbar(z + z^*)/c = -b(z + z^*)$, sua atuação nos dará:

$$\psi(x) = \underbrace{\exp\left(\frac{1}{4}(z^{*2} - z^2)\right)}_{\exp(i\theta_z)} \exp\left(\frac{1}{b} \left(\frac{z - z^*}{\sqrt{2}} \right) q\right) \left\langle q - b \left(\frac{z + z^*}{\sqrt{2}} \right) \middle| 0 \right\rangle. \quad (2.40)$$

Podemos reescrever as somas e diferenças entre z e z^* em termos dos valores esperados, a partir das expressões para $\langle Q \rangle_z$ e $\langle P \rangle_z$ obtidas anteriormente na eq. (2.32):

$$z - z^* = i \frac{\sqrt{2}}{c} \langle P \rangle_z \quad \text{e} \quad z + z^* = \frac{\sqrt{2}}{b} \langle Q \rangle_z, \quad (2.41)$$

assim, obtemos

$$\psi(q) = \exp(i\theta_z) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \langle P \rangle_z q\right) \phi_0(q - \langle Q \rangle_z), \quad (2.42)$$

onde $\phi_0(q) = (2\pi(\Delta Q)^2)^{-1/4} \exp(-(q/2\Delta Q)^2)$ é a função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico [22], centrada em $\langle Q \rangle_z$, de largura ΔQ , e θ_z é uma fase global.

Com isso, podemos começar a ver os estados coerentes de uma forma mais familiar: ao calcular a densidade de probabilidade associada,

$$|\psi(q)|^2 = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{q - \langle Q \rangle_z}{\Delta Q}\right)^2\right), \quad (2.43)$$

verificamos que trata-se de uma função gaussiana centrada em $\langle Q \rangle_z$, com largura ΔQ .

2.6 Completeza

Uma das principais qualidades dos estados coerentes é poder reescrever outros estados em termos destes, e eventualmente usufruir de suas propriedades algébricas. Existe uma característica pouco comum, encontrada na base formada por estados coerentes, que está no fato deles não serem completamente ortogonais: dados dois estados coerentes $|z\rangle$ e $|z'\rangle$, com autovalores do operador de aniquilação z e z' , respectivamente, com $z \neq z'$, teremos:

$$\begin{aligned} \langle z|z'\rangle &= \left(\exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \sum_n \frac{z^{*n}}{\sqrt{n!}} \langle n| \right) \left(\exp\left(-\frac{|z'|^2}{2}\right) \sum_m \frac{z'^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle \right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} (|z|^2 + |z'|^2)\right) \exp(z^* z'). \end{aligned}$$

Tendo esse resultado em mãos, podemos calcular o módulo quadrado do produto interno entre os dois estados coerentes:

$$\begin{aligned} |\langle z|z'\rangle|^2 &= \langle z|z'\rangle \langle z|z'\rangle^* \\ &= \exp\left(-(|z|^2 + |z'|^2 - zz'^* - z^* z')\right). \end{aligned}$$

O termo dentro dos parênteses na exponencial é o módulo quadrado de $z - z'$, nos dando, então,

$$|\langle z|z'\rangle|^2 = \exp(-|z - z'|^2) \neq 0, \quad \forall z, z'. \quad (2.44)$$

Devido a esse fato, os estados coerentes formam o que se chama de um conjunto *supercompleto* (do inglês, *overcomplete*) de estados, tendo uma resolução da identidade um pouco diferente da usual para conjuntos completos, necessitando de uma normalização. A identidade é escrita da seguinte forma [17]:

$$\begin{aligned} \int |z\rangle \langle z| \frac{d^2 z}{\pi} &= \sum_{n,m} |n\rangle \langle m| \underbrace{\int \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \frac{z'^{*m}}{\sqrt{m!}} \exp\left(-\frac{1}{2}(|z|^2 + |z'|^2)\right) \frac{d^2 z}{\pi}}_{\delta_{n,m}} \\ &= \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}, \end{aligned}$$

em que a integral varre todo o plano complexo z .

2.7 Evolução temporal dos estados coerentes

Nesta e na próxima seções, iremos tratar como um estado coerente $|z\rangle$ e seu pacote de onda evoluem no tempo, assim como uma ilustração envolvendo grandezas macroscópicas.

Seja um estado inicial $|\psi(0)\rangle = |z\rangle$ evoluindo de acordo com um Hamiltoniano de um oscilador harmônico, $\mathcal{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$, onde ω é a frequência característica do sistema. Já vimos anteriormente, na eq. (2.32), que os valores esperados para posição e *momentum*, $\langle Q \rangle_z$ e $\langle P \rangle_z$, respectivamente, permanecem iguais aos valores clássicos, eq. (2.8), para os estados coerentes. Utilizando o operador de evolução temporal, podemos obter o estado em um tempo qualquer:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}\right) |\psi(0)\rangle = \exp\left(-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}\right) |z\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}\right) \sum_n \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle, \end{aligned}$$

onde utilizamos o fato de que $|n\rangle$ é um autoestado de \mathcal{H} . Podemos então reescrever a exponencial que contém a energia usando $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$, que é a expressão da energia do oscilador harmônico [22], obtendo assim

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \exp\left(-in\omega t - i\frac{\omega t}{2}\right) |n\rangle, \quad (2.45)$$

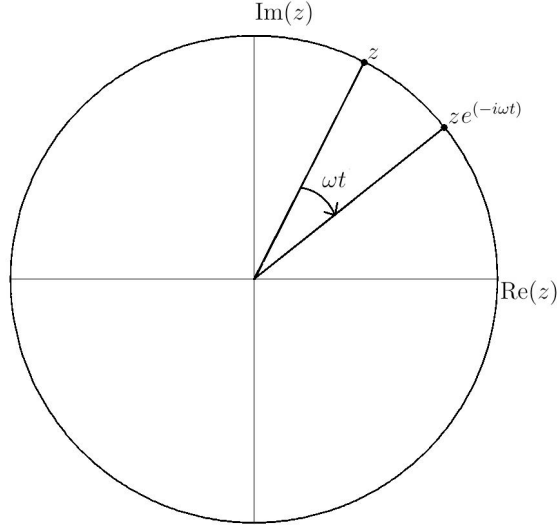


Figura 2.1: Evolução temporal de z .

que, rearranjando, nos dá

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \exp(-in\omega t) |n\rangle \\
 &= \underbrace{\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)}_{\text{fase global}} \underbrace{\left|ze^{-i\omega t}\right\rangle}_{\text{autoket de } a \text{ com autovalor } ze^{-i\omega t}}.
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

Isto nos diz que um autoestado de a evolui para um outro autoestado de a , com seu autovalor associado evoluindo de z para $ze^{-i\omega t}$, como ilustra a fig. 2.1.

Com isso, fica simples calcular os novos valores esperados e as variâncias utilizando a eq. (2.32), bastando utilizar a substituição $z \rightarrow ze^{-i\omega t}$ e a parametrização de z em termos de q e p (posição e *momentum* clássicos) para os valores esperados dos operadores de posição e *momentum*:

$$\begin{aligned}
 \langle Q \rangle_{z(t)} &= q \cos(\omega t) + \frac{p}{m\omega} \sin(\omega t); \\
 \langle P \rangle_{z(t)} &= -m\omega q \sin(\omega t) + p \cos(\omega t); \\
 \langle \mathcal{H} \rangle_{z(t)} &= \hbar\omega \left(|z|^2 + \frac{1}{2}\right).
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

Note que os valores esperados de Q e P nada mais são que as equações de movimento clássicas para o oscilador harmônico. Ao calcular os desvios quadráticos médios,

$$\Delta Q = \frac{b}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad \Delta P = \frac{c}{\sqrt{2}}, \tag{2.48}$$

que, como anteriormente, não dependem do tempo, mantendo a coerência do estado, assim como a incerteza mínima.

2.8 Movimento do pacote de onda e aplicação para o oscilador clássico

Como visto anteriormente, a função de onda para o estado coerente é dada pela eq. (2.42). Agora, levando em conta a evolução temporal,

$$\begin{aligned}\psi(q, t) &= \langle q | \psi(t) \rangle = e^{(-\frac{i\omega t}{2})} \langle q | z e^{(-i\omega t)} \rangle \\ &= \exp(i\theta_z) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \langle P \rangle_{z(t)} q\right) \phi_0\left(q - \langle Q \rangle_{z(t)}\right) e^{(-\frac{i\omega t}{2})},\end{aligned}\quad (2.49)$$

onde θ_z foi definido na eq. (2.40). Calculando seu módulo quadrado,

$$|\psi(q, t)|^2 = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{q - \langle Q \rangle_{z(t)}}{2\Delta Q}\right)^2\right) = |\phi_0(q - \langle Q \rangle_{z(t)})|^2, \quad (2.50)$$

que é o módulo quadrado da autofunção do estado fundamental do oscilador harmônico, deslocada da origem. Seu argumento nos diz que sua forma não varia, porém seu centro evolui no tempo, de acordo com a posição do oscilador harmônico clássico.

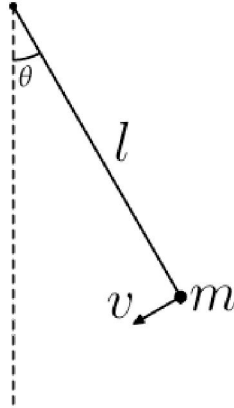


Figura 2.2: Ilustração do problema clássico.

Como uma ilustração de toda essa discussão, segue o tratamento de estados coerentes em regime macroscópico. O sistema, como mostra a fig. 2.2, será uma bolinha de massa $m = 1$ kg, pendurada numa corda com comprimento $l = 0.1$ m e massa desprezível, oscilando com amplitudes pequenas, a ponto de podermos aproximar o período como $T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$, sendo $g \simeq 10$ m/s². Com isso, obtemos um período de $T \simeq 0,64$ s, o que implica uma frequência angular $\omega = \frac{2\pi}{T} \simeq 10$ s⁻¹. Suponha uma amplitude máxima $q_{\max} = 1$ cm. Finalmente, admitindo que o estado quântico possa ser descrito por um estado coerente, podemos calcular os valores que estamos interessados, $|z|$, ΔX , ΔP ,

Δv e v_{\max} (estes dois últimos sendo a variação da velocidade e a velocidade máxima, respectivamente):

$$\begin{aligned}
|z| &= q_{\max} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \simeq 2,2 \cdot 10^{15} \gg 1; \\
\Delta Q &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \simeq 2,2 \cdot 10^{-10} \text{ m}; \\
\Delta P &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \simeq 2,2 \cdot 10^{-17} \text{ kg}\cdot\text{m/s}; \\
\Delta v &= \frac{\Delta P}{m} \simeq 2,2 \cdot 10^{-17} \text{ m/s}; \\
v_{\max} &= q_{\max}\omega = 10^{-1} \text{ m/s}; \\
\frac{\Delta H}{\langle H \rangle} &\simeq \frac{1}{|z|} \simeq 10^{-15} \ll 1,
\end{aligned}$$

demonstrando que, realmente, estados coerentes são apropriados para descrições semiclássicas, pois, como vimos no decorrer desta seção, as incertezas na posição e *momentum* são mínimas, a energia é bem definida em relação ao desvio quadrático médio, e os valores esperados são iguais aos valores clássicos. Dessa maneira, estes são, de fato, os estados mais próximos de um ponto no espaço de fases que conseguimos obter, com a interpretação usual da mecânica quântica, respeitando o Princípio de Incerteza de Heisenberg.

2.9 Estados coerentes bidimensionais e a generalização para um espaço n -dimensional

A generalização para um espaço n -dimensional não é difícil, porém é importante fazê-la. Para começar, vamos trabalhar num espaço bidimensional. Seja $|z_1\rangle$ um estado coerente no espaço de Hilbert \mathcal{H}_1 e $|z_2\rangle$ um estado coerente no espaço de Hilbert \mathcal{H}_2 . Então, o estado coerente de duas dimensões, atuando no espaço de Hilbert total $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, será escrito como:

$$\begin{aligned}
|\mathbf{z}\rangle &= |z_1, z_2\rangle = |z_1\rangle \otimes |z_2\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{|z_1|^2}{2}\right) \sum_n \frac{z_1^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \otimes \exp\left(-\frac{|z_2|^2}{2}\right) \sum_m \frac{z_2^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle,
\end{aligned} \tag{2.51}$$

ou

$$|\mathbf{z}\rangle = \exp\left(-\frac{|z_1|^2}{2} - \frac{|z_2|^2}{2}\right) \sum_{n,m} \frac{z_1^n z_2^m}{\sqrt{n!m!}} |n, m\rangle. \tag{2.52}$$

Operadores que atuam em apenas um espaço de Hilbert \mathcal{H}_i apenas atuam na componente do estado coerente respectiva àquele espaço. Isso significa, por exemplo, que os operadores de aniquilação a_1 e a_2 , que atuam em \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , respectivamente, possuem equações de autovalores da seguinte maneira:

$$a_1 |\mathbf{z}\rangle = a_1 |z_1, z_2\rangle = z_1 |z_1, z_2\rangle = z_1 |\mathbf{z}\rangle; \quad (2.53)$$

$$a_2 |\mathbf{z}\rangle = a_2 |z_1, z_2\rangle = z_2 |z_1, z_2\rangle = z_2 |\mathbf{z}\rangle, \quad (2.54)$$

semelhantemente para todos os outros tipos de operadores. A expressão para o operador de deslocamento é simples,

$$D(z_1, z_2) = D(z_1) D(z_2) = \exp(z_1 a_1^\dagger - z_1^* a_1 + z_2 a_2^\dagger - z_2^* a_2).$$

A equação acima também permite utilizar a eq. (2.36), como é fácil de verificar, obtendo assim

$$D(z_1, z_2) = \exp\left(-\frac{1}{2}|z_1|^2 - \frac{1}{2}|z_2|^2\right) \exp(z_1 a_1^\dagger) \exp(z_2 a_2^\dagger) \exp(z_1^* a_1) \exp(z_2^* a_2). \quad (2.55)$$

Dessa forma, a função de onda para o estado total $\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(x_1, x_2, t)$, é dada por

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= \exp(i(\theta_{z_1} + \theta_{z_2})) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\langle P_1 \rangle_{z_1} x_1 + \langle P_2 \rangle_{z_2} x_2)\right) \\ &\times \phi_0(x_1 - \langle x_1 \rangle_{z_1}) \phi_0(x_2 - \langle x_2 \rangle_{z_2}) = \psi(x_1, t) \psi(x_2, t), \end{aligned} \quad (2.56)$$

com as variâncias e desvios quadráticos médios dependentes do tempo, como dadas na eq. (2.32). Com a expressão para o estado coerente acima, podemos calcular a sobreposição dos estados,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{z}' | \mathbf{z} \rangle &= \langle z'_1, z'_2 | z_1, z_2 \rangle \\ &= \exp\left(-|z_1 - z'_1|^2 - |z_2 - z'_2|^2\right) \\ &= \langle z'_1 | z_1 \rangle \langle z'_2 | z_2 \rangle. \end{aligned} \quad (2.57)$$

A resolução da identidade é dada, então, por

$$\mathbb{1} = \mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2 = \int |z_1\rangle \langle z_1| \frac{d^2 z_1}{\pi} \int |z_2\rangle \langle z_2| \frac{d^2 z_2}{\pi} = \int \frac{d^2 z_1}{\pi} \frac{d^2 z_2}{\pi} |z_1, z_2\rangle \langle z_1, z_2|, \quad (2.58)$$

sendo que as integrais varrem seus respectivos planos complexos.

Vemos, então, que as expressões para multidimensões são extremamente simples, uma

vez que sabemos como é a expressão para o caso unidimensional:

$$\begin{aligned}
|\mathbf{z}\rangle &= |z_1, z_2, \dots, z_n\rangle = \bigotimes_{i=1}^n |z_i\rangle; \\
a_i |\mathbf{z}\rangle &= z_i |\mathbf{z}\rangle; \\
\psi(\mathbf{x}, t) &= \exp\left(i \sum_i \theta_{z_i}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_i \left(\langle P_i \rangle_{z_i} x_i\right)\right) \phi_0\left(\sum_i \left(x_i - \langle x_i \rangle_{z_i}\right)\right) = \prod_{i=1}^n \psi_i(x_i, t) \quad (2.59) \\
\langle \mathbf{z}' | \mathbf{z} \rangle &= \exp\left(-\sum_i \left(|z_i - z'_i|^2\right)\right) = \prod_{i=1}^n \langle z'_i | z_i \rangle; \\
\mathbb{1} &= \int \left(\prod_i \frac{d^2 z_i}{\pi}\right) |z_1, z_2, \dots, z_n\rangle \langle z_1, z_2, \dots, z_n| = \bigotimes_{i=1}^n \mathbb{1}_i.
\end{aligned}$$

Capítulo 3

Integrais de caminho

Neste capítulo, daremos foco a uma parte importante do formalismo utilizado nesta dissertação. Veremos o propagador quântico na base das posições [23], sua forma mais familiar, para mais tarde apresentá-lo na base dos estados coerentes [16], expressão que se será de fato utilizada na dissertação.

3.1 O Propagador Quântico

Na mecânica quântica, quando um Hamiltoniano $\mathcal{H} = T + V$ independente do tempo atua em um estado $|\psi(t_0)\rangle$, a sua evolução temporal é formalmente simples se utilizarmos o operador de evolução temporal $\mathcal{U}(t, t_0) = \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}\right)$:

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) |\psi(t_0)\rangle,$$

nos permitindo escrever sua função de onda como

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{q}'', t) &= \langle \mathbf{q}'' | \psi(t) \rangle = \langle \mathbf{q}'' | \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) |\psi(t_0)\rangle \\ &= \int d^3q' \langle \mathbf{q}'' | \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}\right) | \mathbf{q}' \rangle \langle \mathbf{q}' | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int d^3q' K(\mathbf{q}'', t; \mathbf{q}', t_0) \psi(\mathbf{q}', t_0), \end{aligned} \tag{3.1}$$

sendo \mathbf{q} o vetor de posições do estado, podendo este representar três partículas não-interagentes em uma dimensão ou uma partícula em três dimensões, por exemplo. O objeto $K(\mathbf{q}'', t; \mathbf{q}', t_0) = \langle \mathbf{q}'' | \mathcal{U}(t, t_0) | \mathbf{q}' \rangle$, que aparece como o *kernel* da integral, é conhecido como *propagador quântico*. Para qualquer dado problema, o propagador só depende

do potencial V , e é independente do estado inicial. Este objeto nada mais é do que a *função de Green* do problema com fontes pontuais [23]:

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \mathcal{H}\right) K(\mathbf{q}'', t; \mathbf{q}', t_0) = -i\hbar\delta(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')\delta(t - t_0), \quad (3.2)$$

com condição de contorno $K(\mathbf{q}'', t; \mathbf{q}', t_0) = 0$ para $t < t_0$. Conhecendo a base de autoestados de \mathcal{H} , ao inserir uma unidade entre o operador de evolução $\mathcal{U}(t, t_0)$ e $|\mathbf{q}'\rangle$, é possível escrever o propagador como

$$K(\mathbf{q}'', t; \mathbf{q}', t_0) = \sum_n \langle \mathbf{q}'' | \mathcal{U}(t, t_0) | n \rangle \langle n | \mathbf{q}' \rangle = \sum_n \langle \mathbf{q}'' | n \rangle \langle n | \mathbf{q}' \rangle \exp\left(\frac{-iE_n(t - t_0)}{\hbar}\right), \quad (3.3)$$

sendo $|n\rangle$ um autoestado de \mathcal{H} com autovalor E_n .

Note que, uma vez conhecidos o estado inicial $\psi(\mathbf{q}', t_0)$ e o propagador, a evolução temporal da função de onda pode ser determinada completamente. Duas características importantes do propagador são claras:

- Função de onda. Devido à maneira como o propagador está escrito, podemos interpretá-lo como sendo a função de onda de uma partícula que estava localizada *exatamente* em \mathbf{q}' . Neste caso, \mathbf{q}'' é a variável independente da função de onda;
- $\lim_{t \rightarrow t_0} K(\mathbf{q}'', t; \mathbf{q}', t_0) = \delta^3(\mathbf{q}'' - \mathbf{q}')$. Isso vem do fato de que $\lim_{t \rightarrow t_0} \mathcal{U}(t, t_0) = \mathbb{1}$.

Com essas duas propriedades, podemos interpretar a eq. (3.1) através de uma analogia com a eletrostática: para obter um resultado geral, primeiro avaliamos o problema para uma única “carga” (o propagador), multiplicamos este resultado pela distribuição de cargas (a função de onda $\psi(\mathbf{q}', t_0)$), e integramos em todo o espaço \mathbf{q}' .

A seguir, buscaremos uma versão do propagador escrita como uma soma de contribuições de caminhos no espaço de posições. Tal expressão é aquela em que a aplicação de aproximações semiclássicas é mais natural.

3.2 Propagador como uma amplitude de transição

Para termos uma interpretação ainda melhor do sentido físico do propagador, podemos associá-lo com as amplitudes de transição. O produto interno de $\langle \mathbf{q}' |$, fixo no tempo, com o *ket* $|\psi(t)\rangle$, pode ser visto como o produto interno do *bra* $\langle \mathbf{q}', t - t_0 |$, que trata da

retro-evolução de $\langle \mathbf{q}'' |$ desde t_0 a t , com o *ket* $|\psi(t_0)\rangle$, que é fixo no tempo. Com isso,

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}'', t; \mathbf{q}', t_0) &= \sum_n \langle \mathbf{q}'' | n \rangle \langle n | \mathbf{q}' \rangle \exp\left(\frac{-iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right) \\ &= \sum_n \left\langle \mathbf{q}'' \left| \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}t}{\hbar}\right) \right| n \right\rangle \left\langle n \left| \exp\left(\frac{+i\mathcal{H}t_0}{\hbar}\right) \right| \mathbf{q}' \right\rangle \\ &= \langle \mathbf{q}'', t | \mathbf{q}', t_0 \rangle, \end{aligned}$$

com $|\mathbf{q}', t_0\rangle$ e $\langle \mathbf{q}'', t|$ sendo entendidos como um *autoket* e um *autobra* do operador de posição na representação de Heisenberg, respectivamente. Note que isso nada mais é do que a amplitude de probabilidade de encontrarmos o estado em $|\mathbf{q}'', t\rangle$, uma vez que saímos de um estado inicial $|\mathbf{q}', t_0\rangle$ [22, 23].

Vamos alterar um pouco a notação, por conveniência, para deixar as coordenadas espaço-temporais mais simétricas: no lugar de $|\mathbf{q}', t_0\rangle$, escrevemos $|\mathbf{q}', t'\rangle$, o *ket* $|\mathbf{q}'', t\rangle$ se torna $|\mathbf{q}'', t''\rangle$ e assim por diante. Lembrando que, em qualquer instante de tempo t , os *autokets* de posição na interpretação de Heisenberg formam um conjunto completo, nos possibilita escrever o operador identidade como

$$\int d^3q'' |\mathbf{q}'', t''\rangle \langle \mathbf{q}'', t''| = \mathbb{1}. \quad (3.4)$$

Considere a evolução de t' a t''' : podemos dividir o intervalo (t', t''') em duas partes, (t', t'') e (t'', t''') , obtendo

$$\langle \mathbf{q}''', t''' | \mathbf{q}', t' \rangle = \int d^3q'' \langle \mathbf{q}''', t''' | \mathbf{q}'', t'' \rangle \langle \mathbf{q}'', t'' | \mathbf{q}', t' \rangle, \quad (t''' > t'' > t'), \quad (3.5)$$

que expressa a *propriedade de composição* da amplitude de transição. Podemos utilizá-la para dividir o intervalo de tempo em quantos subintervalos quisermos. Se, de alguma maneira, soubermos a forma de $\langle \mathbf{q}'', t'' | \mathbf{q}', t' \rangle$ para um tempo *infinitesimal* (entre t' e $t' + dt$), podemos obter a amplitude $\langle \mathbf{q}'', t'' | \mathbf{q}', t' \rangle$ para um tempo finito, compondo as amplitudes de transição apropriadas para intervalos de tempo infinitesimais, de maneira análoga à eq. (3.5). Isso levou a uma formulação independente da mecânica quântica por Feynman, que iremos esboçar na próxima subseção [23].

3.3 Integrais de caminho

Sem perda de generalidade, iremos tratar aqui apenas o problema unidimensional. A generalização para várias dimensões é direta. Por clareza, para não escrever $q' \cdots'$, com n

linhas no total, vamos usar a notação q_n . Com essa notação, consideramos a amplitude de transição de uma partícula indo de um ponto inicial no espaço-tempo (q_1, t_1) para o ponto final (q_N, t_N) . O intervalo de tempo total entre t_1 e t_N pode ser dividido em $N - 1$ partes iguais,

$$t_j - t_{j-1} = \Delta t = \frac{t_N - t_1}{N - 1}, \quad \text{com } j = 2, \dots, N. \quad (3.6)$$

Utilizando a propriedade de composição, proveniente da eq. (3.5) (assumindo $t_j > t_{j-1}$), obtemos

$$\begin{aligned} \langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle &= \int dq_{N-1} dq_{N-2} \dots dq_2 \langle q_N, t_N | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \\ &\times \langle q_{N-1}, t_{N-1} | q_{N-2}, t_{N-2} \rangle \dots \langle q_2, t_2 | q_1, t_1 \rangle. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Para interpretar o que essa expressão significa, consideramos o plano do espaço-tempo na fig. 3.1. Os pontos inicial e final, (q_1, t_1) e (q_N, t_N) , respectivamente, são fixos. Para cada segmento de tempo, entre t_j e t_{j-1} , nós somos instruídos a considerar a amplitude de transição que leva de (q_{j-1}, t_{j-1}) a (q_j, t_j) . Então, integramos sobre q_2, q_3, \dots, q_{N-1} . Isso significa que *somamos sobre todos os possíveis caminhos* no espaço-tempo, com os pontos inicial e final fixos. Quando dizemos *caminhos*, estamos também assumindo que tais caminhos não necessariamente obedecem a uma equação de movimento, contrastando, então, com as *trajetórias*.

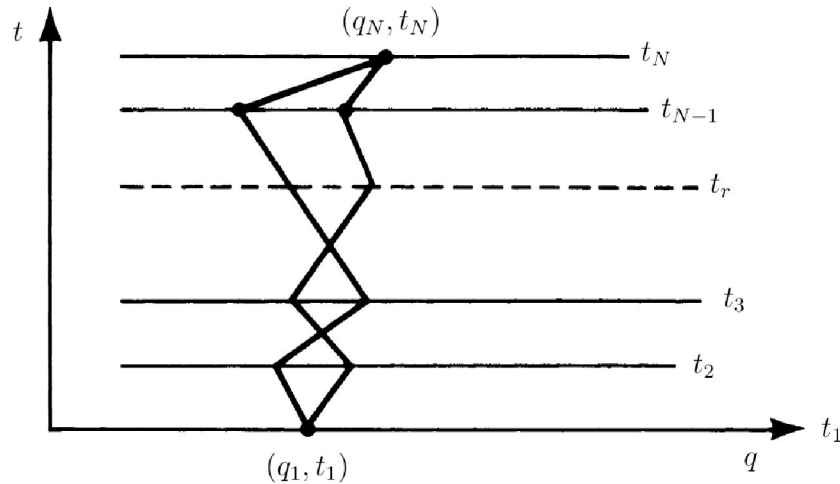


Figura 3.1: Diversos caminhos para a integral de caminho. Imagem retirada de [23].

A ideia de trabalhar com caminhos provém, em partes, da mecânica clássica. Utilizando o formalismo Lagrangeano, suponha que temos uma partícula sujeita a um campo

de forças derivável de um potencial $V(q)$. A Lagrangeana clássica é escrita como

$$L_{\text{clássica}}(q, \dot{q}) = \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q). \quad (3.8)$$

Dada esta Lagrangeana com pontos finais fixos (q_1, t_1) e (q_N, t_N) especificados, nós *não* consideramos qualquer caminho que liga (q_1, t_1) e (q_N, t_N) na mecânica clássica. Pelo contrário, deve existir um *único* caminho que corresponde ao movimento real da partícula clássica, este proveniente do princípio de Hamilton: o caminho que a partícula segue é aquele que minimiza a ação, definida como a integral temporal da Lagrangeana clássica:

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_N} dt L_{\text{clássica}}(q, \dot{q}) = 0, \quad (3.9)$$

de onde podemos obter as equações de Euler-Lagrange para a dinâmica do sistema [18, 19].

3.4 Formulação de Feynman

Com toda essa discussão, as diferenças entre as mecânicas clássica e quântica são aparentes. Na mecânica clássica, um caminho definido no plano espaço-temporal é associado com o movimento da partícula. Em contraste, na mecânica quântica, todos os possíveis caminhos devem contribuir para a dinâmica, inclusive aqueles que não tem qualquer semelhança com o caminho clássico. Porém, de alguma maneira, devemos conseguir reproduzir os resultados da mecânica clássica, à medida que nos aproximamos suavemente do limite formal $\hbar \rightarrow 0$. Como?

A tentativa de Feynman para atacar este problema foi a seguinte. Procurando por pistas, em um livro de Dirac, ele encontrou uma anotação que diz (utilizando a nossa linguagem moderna)

$$\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_N} dt L_{\text{clássica}}(q, \dot{q}) \right) \quad \text{corresponde a} \quad \langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle.$$

Ao ler isso, Feynman ficou intrigado. “Corresponde a” significa a mesma coisa que “é igual a” ou, mais especificamente, devido à dimensionalidade do propagador, “é proporcional a”? A tentativa de responder essa pergunta o levou à formulação da mecânica quântica baseada em *integrais de caminho*.

Na formulação de Feynman, a ação clássica tem um papel muito importante. Por conveniência, introduzimos a notação

$$S(n, n-1) \equiv \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt L_{\text{clássica}}(q, \dot{q}). \quad (3.10)$$

Devido ao fato de que $L_{\text{clássica}}$ é função de q e \dot{q} , $S(n, n-1)$ só é definida após definirmos um caminho específico, ao longo do qual a integração será realizada. Concentremos nossa atenção num pequeno segmento ao longo desse caminho, por exemplo entre (q_{n-1}, t_{n-1}) e (q_n, t_n) . De acordo com Dirac, somos instruídos a associar $\exp[iS(n, n-1)/\hbar]$ com esse segmento. Seguindo ao longo desse caminho, nós multiplicamos sucessivamente diversas expressões desse tipo, para obter

$$\prod_{n=2}^N \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(n, n-1)\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{n=2}^N S(n, n-1)\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(N, 1)\right]. \quad (3.11)$$

Poderíamos achar que essa expressão nos dá $\langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle$, porém estaríamos equivocados. A expressão acima nos dá a contribuição para $\langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle$ proveniente do caminho particular que escolhemos. Ainda precisamos integrar sobre todos os q_2, q_3, \dots, q_{N-1} . Ao mesmo tempo, utilizando a propriedade de composição, deixamos o intervalo de tempo entre t_n e t_{n-1} ser infinitesimalmente pequeno. Então, nossa candidata à expressão para $\langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle$ pode ser escrita, em um sentido meio solto ainda, como

$$\langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle \sim \sum_{\text{todos os caminhos}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(N, 1)\right], \quad (3.12)$$

com a soma sendo feita em um conjunto infinito, não-numerável, de caminhos.

Antes de continuarmos, vamos analisar o limite clássico. À medida em que $\hbar \rightarrow 0$, a exponencial acima oscila violentamente ao varrer o espaço de integração, com uma tendência de cancelamento entre as várias contribuições de caminhos vizinhos (no sentido de caminhos que variam muito pouco entre si). Isso se dá porque a diferença de fases de $\exp[iS/\hbar]$ para caminhos levemente diferentes é muito grande, devido ao quão pequeno \hbar é. Porém, \hbar é um número, uma constante física da natureza. Como a natureza realiza, na prática, este limite? Ao analisar o argumento da exponencial acima, vemos que o termo oscilatório depende da razão S/\hbar . A ação clássica, como é fácil de observar, depende da massa. Por exemplo, para a partícula livre, a Lagrangeana do problema depende da energia cinética $m\dot{q}^2/2$. Assim, estamos comparando as ordens de grandeza de S , que depende de m , e \hbar . Ao estudar um sistema cuja massa seja muito grande, estamos dizendo que a ação deste é um valor muito grande, quando comparado com \hbar . Dessa maneira, $\hbar \rightarrow 0$, no fundo, implica em $S \rightarrow \infty$.

Então, efetivamente a maioria dos caminhos *não* contribui quando \hbar é considerado uma quantidade pequena. Há, porém, uma importante exceção. Suponha termos um

determinado caminho que satisfaz

$$\delta S(N, 1) = 0, \quad (3.13)$$

sendo a variação em S devida a uma leve deformação no caminho, com os extremos fixos. Este é precisamente o caminho clássico, previsto pelo princípio de Hamilton. Denotamos esta ação que satisfaz a equação acima de S_{\min} . Ao tentar deformar o caminho levemente a partir do caminho clássico, a ação S resultante ainda é igual a S_{\min} , considerando a deformação em primeira ordem. Isso implica que a fase de $\exp[iS/\hbar]$ não varia muito quando nos desviamos levemente do caminho clássico, mesmo com \hbar pequeno. Como resultado, enquanto permanecemos próximo ao caminho clássico, interferência construtiva entre caminhos vizinhos é possível. No limite $\hbar \rightarrow 0$, as maiores contribuições devem então surgir de uma faixa muito fina (ou um tubo/hipertubo em muitas dimensões) contendo a trajetória clássica. A ideia de Feynman funciona muito bem, porque no limite $\hbar \rightarrow 0$, o único caminho que contribui é exatamente o caminho clássico.

Finalmente, para formular a conjectura de Feynman mais precisamente, vamos voltar à expressão para $\langle q_n, t_n | q_{n-1}, t_{n-1} \rangle$, onde a diferença $t_n - t_{n-1}$ é tida como infinitamente pequena. Escrevemos

$$\langle q_n, t_n | q_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \frac{1}{w(\Delta t)} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(n, n-1) \right], \quad (3.14)$$

onde calculamos $S(n, n-1)$ num regime em que $\Delta t = t_n - t_{n-1} \rightarrow 0$. Note que inserimos um fator de peso $w(\Delta t)$, que assumimos depender apenas do intervalo $t_n - t_{n-1}$, e não depender de $V(q)$. Claramente, esse fator é necessário para dimensionalizar corretamente os dois lados da equação, já que, da maneira com a qual os *autokets* de posição são normalizados, $\langle q_n, t_n | q_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ deve ter dimensão de inverso de comprimento.

Adotando o potencial de partícula livre, $V(q) = 0$, já que $w(\Delta t)$ é independente de $V(q)$, é possível mostrar [23] que

$$\frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}}. \quad (3.15)$$

Então,

$$\langle q_n, t_n | q_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(n, n-1) \right], \quad (3.16)$$

e a expressão final para a amplitude de transição com $t_N - t_1$ finito é

$$\begin{aligned} \langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{(N-1)/2} \\ &\times \int dq_{N-1} dq_{N-2} \dots dq_2 \prod_{n=2}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(n, n-1) \right], \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde o limite $N \rightarrow \infty$ é tomado com q_N e t_N fixos. Definindo um operador integral infinito-dimensional,

$$\int_{q_1}^{q_N} \mathcal{D}(q(t)) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{(N-1)/2} \times \int dq_{N-1} dq_{N-2} \dots dq_2, \quad (3.18)$$

podemos escrever a eq. (3.17) como

$$\langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle = \int_{q_1}^{q_N} \mathcal{D}(q(t)) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_N} L_{\text{clássica}}(q, \dot{q}) \right]. \quad (3.19)$$

Esta expressão é conhecida como *integral de caminho de Feynman*. Seu significado como uma soma sobre todos os possíveis caminhos é aparente ao olhar atentamente para a eq. (3.17).

Segundo a abordagem exposta aqui, os passos seguidos para obter a eq. (3.19) não devem ser vistos como uma derivação realizada dentro do formalismo quântico. Na verdade, Feynman tentou construir uma nova formulação da mecânica quântica, baseada no conceito de caminhos, motivado pela misteriosa frase de Dirac. As únicas ideias emprestadas da formulação usual da mecânica quântica foram:

- o princípio de superposição, usado na soma das contribuições dos vários caminhos;
- a propriedade de composição da amplitude de transição;
- e a correspondência clássica no limite $\hbar \rightarrow 0$.

É possível mostrar que a expressão para $\langle q_N, t_N | q_1, t_1 \rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo nas variáveis q_N, t_N , como mostrado em [23].

Capítulo 4

A aproximação semiclássica do propagador em estados coerentes

Até o presente momento, estávamos trabalhando ou no regime puramente quântico, ou no limite puramente clássico. A aproximação semiclássica consiste de um meio termo, e o formalismo utilizado aqui se servirá dos assuntos discutidos nos capítulos anteriores.

4.1 O propagador em estados coerentes

Apresentamos anteriormente o propagador de Feynman, que aparece no formalismo das integrais de caminho. Sua definição era, na representação de Schrödinger, para um Hamiltoniano independente do tempo,

$$K(\mathbf{q}'', t''; \mathbf{q}', t') = \langle \mathbf{q}'' | \mathcal{U}(t'', t') | \mathbf{q}' \rangle. \quad (4.1)$$

Aqui, utilizamos como base para o cálculo do propagador, estados de posição bem definida (autoestados do operador de posição). Essa não é a única opção para o cálculo do propagador. Estamos, de fato, interessados na base de estados coerentes, estudada no capítulo 2. Ao projetar o estado $|\psi(t'')\rangle = \mathcal{U}(t'', t') |\psi(t')\rangle$ num estado coerente $|\mathbf{z}''\rangle$,

$$\langle \mathbf{z}'' | \psi(t'') \rangle = \int \frac{d^2 \mathbf{z}'}{\pi} \langle \mathbf{z}'' | \mathcal{U}(t'', t') | \mathbf{z}' \rangle \langle \mathbf{z}' | \psi(t') \rangle. \quad (4.2)$$

Como anteriormente, o *kernel* da integral é o propagador na base de estados coerentes, que se escreve como

$$K(\mathbf{z}'', t''; \mathbf{z}', t') = \langle \mathbf{z}'' | \mathcal{U}(t'', t') | \mathbf{z}' \rangle. \quad (4.3)$$

Podemos, novamente, interpretar $K(\mathbf{z}'', t''; \mathbf{z}', t')$ como sendo a projeção de um estado $|\mathbf{z}''\rangle$ em um estado $|\mathbf{z}'\rangle$, evoluído no tempo de t' a t'' , sob ação de um Hamiltoniano \mathcal{H} . Ou seja, é a amplitude de probabilidade de encontrarmos, no instante $t = t''$, o estado $|\mathbf{z}''\rangle$, partindo de um estado $|\mathbf{z}'\rangle$ no instante $t = t'$.

Vamos agora dividir o intervalo de tempo $T = t'' - t'$ em N partes iguais, de duração $\epsilon = T/N$, tal que

$$\mathcal{U}(t'', t') = \mathcal{U}(T) = \exp\left[-\frac{i\mathcal{H}T}{\hbar}\right] = \prod_{n=1}^N \exp\left[-\frac{i\mathcal{H}\epsilon}{\hbar}\right]. \quad (4.4)$$

Escrevendo o operador de evolução desta maneira, podemos introduzir $(N-1)$ identidades, escritas na base dos estados coerentes, como mostrado na eq. (2.59), entre cada um dos termos. Como um exemplo, para $N = 2$, temos

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{z}'' | \mathcal{U}(t'', t') | \mathbf{z}' \rangle &= \left\langle \mathbf{z}'' \left| \exp\left[-\frac{i\mathcal{H}\epsilon}{\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\mathcal{H}\epsilon}{\hbar}\right] \right| \mathbf{z}' \right\rangle \\ &= \int \frac{d^2\mathbf{z}}{\pi} \left\langle \mathbf{z}'' \left| \exp\left[-\frac{i\mathcal{H}\epsilon}{\hbar}\right] \right| \mathbf{z} \right\rangle \left\langle \mathbf{z} \left| \exp\left[-\frac{i\mathcal{H}\epsilon}{\hbar}\right] \right| \mathbf{z}' \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Para N qualquer,

$$K(\mathbf{z}'', t''; \mathbf{z}', t') = \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^2\mathbf{z}_j}{\pi} \right) \times \prod_{k=0}^{N-1} \left\langle \mathbf{z}_{k+1} \left| \exp\left[-\frac{i\mathcal{H}\epsilon}{\hbar}\right] \right| \mathbf{z}_k \right\rangle, \quad (4.6)$$

com $\mathbf{z}' = \mathbf{z}_0$ e $\mathbf{z}'' = \mathbf{z}_N$. Por conveniência, devido ao fato de que o valor importante é a diferença entre t'' e t' , vamos introduzir a notação $K(\mathbf{z}'', t''; \mathbf{z}', t') = K(\mathbf{z}'', \mathbf{z}', T)$. Note que os termos no segundo produtório nada mais são que propagadores com tempo de evolução ϵ . Como mais tarde iremos fazer o limite $\epsilon \rightarrow 0$, podemos expandir a exponencial até primeira ordem:

$$K(\mathbf{z}_{k+1}, \mathbf{z}_k, \epsilon) \approx \langle \mathbf{z}_{k+1} | \mathbf{z}_k \rangle \left[1 - \frac{i\epsilon \tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}}}{\hbar} + \dots \right] \approx \langle \mathbf{z}_{k+1} | \mathbf{z}_k \rangle \exp\left[-\frac{i\epsilon \tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}}}{\hbar}\right], \quad (4.7)$$

com $\tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}} = \frac{\langle \mathbf{z}_{k+1} | \mathcal{H} | \mathbf{z}_k \rangle}{\langle \mathbf{z}_{k+1} | \mathbf{z}_k \rangle}$. Utilizando a propriedade de não-ortogonalidade dada pela eq. (2.59), $\langle \mathbf{z}' | \mathbf{z} \rangle = \prod_{i=1}^n \langle z'_i | z_i \rangle$, podemos, então, escrever o propagador infinitesimal como

$$\left\langle \mathbf{z}_{k+1} \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\epsilon\right] \right| \mathbf{z}_k \right\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\epsilon \tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_{k+1}|^2 + |\mathbf{z}_k|^2 \right) + \mathbf{z}_{k+1}^* \mathbf{z}_k \right]. \quad (4.8)$$

Com essa expressão, o propagador fica

$$K(\mathbf{z}'', t''; \mathbf{z}', t') \simeq \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^2\mathbf{z}_j}{\pi} \right) \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathcal{F}\right], \quad (4.9)$$

onde $\exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{F} \right] = \prod_{k=0}^{N-1} K(\mathbf{z}_{k+1}^*, \mathbf{z}_k, \epsilon)$, rearranjado de forma conveniente, vale

$$\exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{F} \right] = \exp \left[\sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1}^* - \mathbf{z}_k^*}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_k - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1} - \mathbf{z}_k}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_{k+1}^* \right) \right]. \quad (4.10)$$

A eq. (4.9) nada mais é do que o propagador de Feynman, na representação de estados coerentes, discretizado no tempo. Para esta equação se identificar com as integrais de caminho conhecidas, basta assumir que os caminhos sejam contínuos, tomar o limite $N \rightarrow \infty$ (o que implica $\epsilon \rightarrow 0$, enquanto mantemos $T = N\epsilon$ finito), e escrever \mathbf{z}' e \mathbf{z}'' em função de \mathbf{q}' , \mathbf{p}' , \mathbf{q}'' e \mathbf{p}'' (veja a eq. (2.4)):

$$z'_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q'_r}{b_r} + i \frac{p'_r}{c_r} \right) \quad \text{e} \quad z''_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q''_r}{b_r} + i \frac{p''_r}{c_r} \right), \quad (4.11)$$

com $r = x, y$. No limite em questão ($\epsilon \rightarrow 0$), os termos que dependem de z_k e z_{k+1} (e seus complexos conjugados) são escritos como:

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1}^* - \mathbf{z}_k^*}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_k \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1} - \mathbf{z}_k}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_{k+1}^* \end{cases} \implies \begin{cases} \frac{dz^*}{dt} z \\ \frac{dz}{dt} z^* \end{cases}. \quad (4.12)$$

Ao escrever z e z^* através da parametrização em \mathbf{q} e \mathbf{p} , os termos acima podem ser reescritos como

$$\begin{aligned} \frac{dz^*}{dt} z &= \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{q}}{b^2} + \frac{\dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{p}}{c^2} + \frac{i}{\hbar} (\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}}) \right) \quad \text{e} \\ \frac{dz}{dt} z^* &= \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{q}}{b^2} + \frac{\dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{p}}{c^2} - \frac{i}{\hbar} (\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}}) \right). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Dessa forma, a soma de tais termos, de acordo com a eq. (4.9), se dá, no limite $\epsilon \rightarrow 0$, por

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1}^* - \mathbf{z}_k^*}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_k - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1} - \mathbf{z}_k}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_{k+1}^* \implies \frac{i}{2\hbar} (\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}}). \quad (4.14)$$

Quando aplicamos o limite $\epsilon \rightarrow 0$, o termo $\tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}}$ se torna $\tilde{\mathcal{H}} = \langle \mathbf{z} | \mathcal{H} | \mathbf{z} \rangle$. A soma discreta vira uma soma contínua (uma integral), e por fim, obtemos

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{F} = \int_{t'}^{t''} dt \left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{\mathcal{H}} + \frac{i}{2\hbar} (\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}}) \right). \quad (4.15)$$

O termo com $\tilde{\mathcal{H}}$ não pode ser trabalhado por enquanto, pois este é particular para cada sistema. O restante da integral pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \frac{i}{2\hbar} \int_{t'}^{t''} dt (\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}}) &= \frac{i}{2\hbar} \int_{t'}^{t''} dt (\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} + \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}}) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \frac{i}{2\hbar} \int_{t'}^{t''} dt (\dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}}) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \frac{i}{2\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \frac{d}{dt} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{p}) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{p} - \frac{i}{2\hbar} (\mathbf{q}'' \cdot \mathbf{p}'' - \mathbf{q}' \cdot \mathbf{p}'), \end{aligned} \quad (4.16)$$

nos permitindo obter

$$K(\mathbf{q}', \mathbf{p}', \mathbf{q}'', \mathbf{p}'', T) \simeq \int \frac{\mathcal{D}^2[\mathbf{q}(t)] \mathcal{D}^2[\mathbf{p}(t)]}{4\hbar^2 \pi^2} \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\int_0^T (\dot{\mathbf{q}} \mathbf{p} - \mathcal{H}) dt - \frac{1}{2} (\mathbf{p}'' \mathbf{q}'' - \mathbf{p}' \mathbf{q}') \right) \right], \quad (4.17)$$

onde definimos o operador

$$\frac{\mathcal{D}^2[\mathbf{q}(t)] \mathcal{D}^2[\mathbf{p}(t)]}{4\hbar^2 \pi^2} = \prod_{j=1}^{N-1} \frac{d^2 \mathbf{z}_j}{\pi}, \quad (4.18)$$

Esta equação, que não envolve nenhuma aproximação, exceto a suposição de que os caminhos são contínuos, indica que todos os caminhos que saem de $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ e chegam a $(\mathbf{q}'', \mathbf{p}'')$ contribuem para o propagador quântico. A amplitude de probabilidade do estado $|\mathbf{z}'\rangle$ ser medido como $|\mathbf{z}''\rangle$ após o tempo T leva em consideração todos esses caminhos possíveis. Tais caminhos não obedecem necessariamente a uma equação, como acontece com as trajetórias clássicas, que são regidas pelas equações de Euler-Lagrange (ou, para fazer um paralelo melhor com a mecânica quântica, com as equações de Hamilton). A quantidade \mathcal{F} , que, a menos da fase $-\frac{1}{2} (\mathbf{p}'' \mathbf{q}'' - \mathbf{p}' \mathbf{q}')$, pode ser identificada como a ação correspondente ao caminho, é o peso da contribuição de cada um deles.

4.2 A integral de ponto de sela ou método dos declives mais íngremes

Para resolver a integral da eq. (4.9), podemos utilizar uma extensão do método de ponto de sela, que se baseia nas ideias do método de fase estacionária. Em [24], há uma descrição mais detalhada do método. Nesta subseção, apresentaremos apenas seus pontos principais.

O método de *fase estacionária* é utilizado para calcular integrais do tipo

$$\mathcal{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} f(x) \right] dx, \quad (4.19)$$

no limite $\hbar \rightarrow 0^+$, com $x, \hbar \in \mathbb{R}$. Assumimos aqui que $f(x)$ e $g(x)$ são funções bem comportadas em x . O método também é aplicável a limites de integração arbitrários, porém nos restringiremos a esse caso particular.

A ideia por trás do método está no fato do integrando ser um termo oscilatório em x . No limite assintótico estudado, a exponencial oscilará muito rapidamente, devido ao fator $1/\hbar$. Nesta situação, no cálculo da integral, as contribuições positivas e negativas tendem

a se cancelar, exceto quando o intervalo de integração inclui uma região onde o argumento da exponencial é estacionário, fazendo com que as oscilações cessem nesta região específica. Um cuidado deve ser tomado nos extremos de integração, cujas contribuições nem sempre podem ser desprezadas. No entanto, estudaremos os casos onde o integrando se anula quando $x \rightarrow \pm\infty$. Tais pontos, onde o cálculo da integral é relevante, são denominados *pontos críticos*.

Para resolver essa integral, então, precisaremos identificar os pontos estacionários de $f(x)$, que são os pontos que satisfazem $\frac{df}{dx} = 0$. Feito isso, estimamos a contribuição de cada ponto estacionário, assim como a da sua respectiva vizinhança. Se existirem mais de um ponto estacionário, devemos somar a contribuição de todos eles. O cálculo da contribuição para cada ponto, incluindo sua vizinhança, pode ser feito através de uma simples expansão de Taylor de $f(x)$ e $g(x)$ em torno do ponto estacionário. Em geral, é suficiente, para obter-se um bom resultado, uma expansão até segunda ordem.

O método de ponto de sela se utiliza da mesma ideia de fase estacionária e pontos críticos para resolver integrais de linha no plano complexo do tipo

$$\mathcal{I}_C = \int_C g(z) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} f(z) \right] dz, \quad (4.20)$$

também no limite $\hbar \rightarrow 0^+$, com $\hbar \in \mathbb{R}$. Assim como assumimos $f(x)$ e $g(x)$ como funções bem comportadas em x , aqui assumimos que $f(z)$ e $g(z)$ são analíticas numa região que contém C . Partindo do mesmo raciocínio de antes, a integração da eq. (4.20) oscila muito violentamente no limite assintótico analisado, anulando a integral. Porém, se C coincidir com qualquer curva de nível C' de $\text{Re}(f(z))$, eliminamos estas oscilações de alta frequência. Com isso, a integral (4.20) se reduz a

$$\mathcal{I}_{C'} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \text{Re}[f(z)]|_{C'} \right] \int_{C'} g(z) \exp \left[\frac{\text{Im}[f(z)]}{\hbar} \right] dz. \quad (4.21)$$

Dentre todas as infinitas curvas C' possíveis, existe uma com características especiais, capaz de deixar o cálculo da integral muito simples. Uma das atribuições para esse caminho bom é que ele comece e termine em regiões onde $\text{Im}[f(z)] = -\infty$, o que implica na contribuição dos extremos da integração serem nulos. Além disso, o caminho deve passar por um extremo de $\text{Im}[f(z)]$, que é o ponto crítico de $f(z)$ (ou ponto de sela). É possível mostrar [24] que as curvas de nível de $\text{Re}[f(z)]$ que passam por um ponto de sela de $f(z)$ são os caminhos com os declives e aclives mais íngremes. Porém, como gostaríamos

de satisfazer a condição $\text{Im}[f(z)] = -\infty$ nos limites de C' , devemos considerar somente os declives mais íngremes que emanam do ponto de sela.

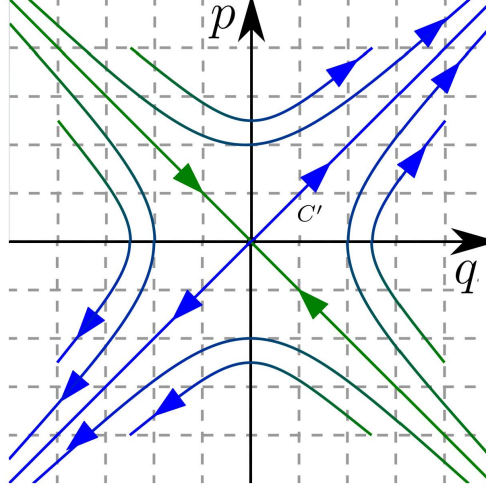


Figura 4.1: O caminho C será deformado até o caminho C' que passa pelo ponto de sela z_0 (aqui representado pela origem do plano). As curvas verdes são pontos de *active* e as azuis são as curvas de *declive*. Mesmo que soubéssemos como realizar a integral em qualquer um dos outros caminhos, o caminho C' é o que mais facilita tal cálculo no limite assintótico de interesse, $\hbar \rightarrow 0$.

Dessa forma, no limite assintótico estudado, $\hbar \rightarrow 0$, a contribuição do ponto de sela é dominante no cálculo das integrais: ao se afastar levemente do ponto de sela z_0 , a contribuição é desprezível, pois $\text{Im}[f(z_0)] > \text{Im}[f(z)]$ para qualquer z pertencente ao novo caminho C' , com $z \neq z_0$, e com isso $\exp\left[\frac{\text{Im}[f(z_0)]}{\hbar}\right] \gg \exp\left[\frac{\text{Im}[f(z)]}{\hbar}\right]$. Então, utilizando-nos desse fato, ao calcular a contribuição do ponto de sela, expandimos $f(z)$ em sua vizinhança. Da mesma forma que anteriormente, em geral, expansões até segunda ordem são suficientes. Com isso, transformaremos a integral numa integral gaussiana, que possui solução conhecida.

Há alguns problemas na utilização desse método. Nada nos garante que o caminho original C da integral coincida com o caminho bom C' . Felizmente, o Teorema Integral de Cauchy nos permite deformar o contorno de integração suficientemente, sem alterar o valor numérico da integral, sob algumas condições. Para ilustrar isso, considere a seguinte situação: estamos interessados em realizar a integral complexa

$$\int_C U(z) dz.$$

Para aplicar o Teorema Integral de Cauchy, a integral precisa ser fechada. Considere o caminho $\tilde{C} = C + C''$, onde C'' é escolhido convenientemente. Agora, iremos deformar

o caminho C para C' . Se fizermos isso com cuidado, de maneira que o caminho fechado $\tilde{C}' = C' + C''$ não altere os polos de $U(z)$ no interior de \tilde{C} , o teorema nos diz que

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{C}} U(z)dz &= \int_{\tilde{C}'} U(z)dz \\ \implies \int_C U(z)dz + \int_{C''} U(z)dz &= \int_{C'} U(z)dz + \int_{C''} U(z)dz \\ \implies \int_C U(z)dz &= \int_{C'} U(z)dz, \end{aligned} \quad (4.22)$$

independentemente do caminho C'' que escolhermos.

Dessa forma, o método consiste também em alterar o contorno original para aquele que deixa o cálculo mais simples. Podemos resumir o procedimento em 5 passos, de acordo com [24]:

- Identificar os pontos críticos do integrando: pontos de sela de $f(z)$, extremos de integração e singularidades de $f(z)$ e/ou $g(z)$;
- Determinar os caminhos de declive mais íngremes que partem de cada ponto de sela;
- Justificar, via Teorema Integral de Cauchy, a deformação do contorno original naqueles encontrados no segundo passo;
- Calcular a expansão assintótica da integral, ao longo do novo caminho, em torno de cada ponto encontrado;
- Somar as contribuições de cada expansão realizada.

Dentre esses cinco passos, o segundo e terceiro, que devemos aplicar simultaneamente, são mais delicados. Não é uma dificuldade conceitual; sua implementação computacional é difícil. É possível que haja pontos de sela que não possam ser considerados, devido ao fato de que não há como deformar o contorno original de integração para os caminhos de declives mais íngremes que passam por eles, sem alterar o valor numérico da integral. A inclusão de tais pontos “proibidos” leva a resultados espúrios, sendo esta característica a única maneira prática de identificar tais pontos.

4.3 Trajetórias clássicas estendidas para o plano complexo

O propagador em estados coerentes envolve a integral

$$\int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^2 \mathbf{z}_j}{\pi} \right) \exp \left[\sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1}^* - \mathbf{z}_k^*}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_k - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{z}_{k+1} - \mathbf{z}_k}{\epsilon} \right) \mathbf{z}_{k+1}^* \right) \right],$$

que é equivalente à integral de ponto de sela na eq. (4.20). A diferença é que aqui temos uma integral em $4(N-1)$ dimensões, ao invés da integral unidimensional anterior. Porém, *em geral*, \mathcal{F} não apresenta pontos estacionários nos caminhos originais de integração (os eixos reais $q_{x,j}$, $q_{y,j}$, $p_{x,j}$ e $p_{y,j}$, com $j = 1, 2, \dots, N-1$). Devemos então considerar uma *extensão analítica* das variáveis de integração, e assim poder encontrar pontos críticos de \mathcal{F} .

4.3.1 Extensão das variáveis

Segundo a análise anterior, a partir de agora, iremos considerar a hipótese de que $q_{x,j}$, $q_{y,j}$, $p_{x,j}$ e $p_{y,j}$ possam ser números complexos. Com isso, $z_{r,j} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_{r,j}}{b_r} + i \frac{p_{r,j}}{c_r} \right)$ não possui mais $z_{r,j}^* \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_{r,j}}{b_r} - i \frac{p_{r,j}}{c_r} \right)$ como seu complexo conjugado, e vice-versa: o complexo conjugado de $z_{r,j}$ deve ser $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_{r,j}^*}{b_r} - i \frac{p_{r,j}^*}{c_r} \right)$. Uma ilustração da mudança de variáveis pode ser vista na fig. 4.2. Assim, iremos modificar a nossa notação. A partir de agora,

$$z_{r,j} \rightarrow u_{r,j} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_{r,j}}{b_r} + i \frac{p_{r,j}}{c_r} \right) \quad \text{e} \quad z_{r,j}^* \rightarrow v_{r,j} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_{r,j}}{b_r} - i \frac{p_{r,j}}{c_r} \right), \quad (4.23)$$

com $q_{r,j}$ e $p_{r,j}$ podendo ser complexos. Dessa forma, $u_{r,j}^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_{r,j}^*}{b_r} + i \frac{p_{r,j}^*}{c_r} \right) \neq v_{r,j}$. Vectorialmente, $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ e $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$. Também devemos reescrever as variáveis de integração,

$$\frac{d^2 \mathbf{z}_j}{\pi} = \frac{d^2 \mathbf{z}_j d^2 \mathbf{z}_j^*}{(2\pi i)^2} \rightarrow \frac{d^2 \mathbf{u}_j d^2 \mathbf{v}_j}{-4\pi^2}. \quad (4.24)$$

4.3.2 Trajetória crítica e limite contínuo

Como primeiro passo para o cálculo da integral da eq. (4.9), devemos calcular os pontos críticos de \mathcal{F} . Tais pontos devem satisfazer

$$\delta \mathcal{F} = \sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial u_{r,j}} \delta u_{r,j} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial v_{r,j}} \delta v_{r,j} \right] = 0. \quad (4.25)$$

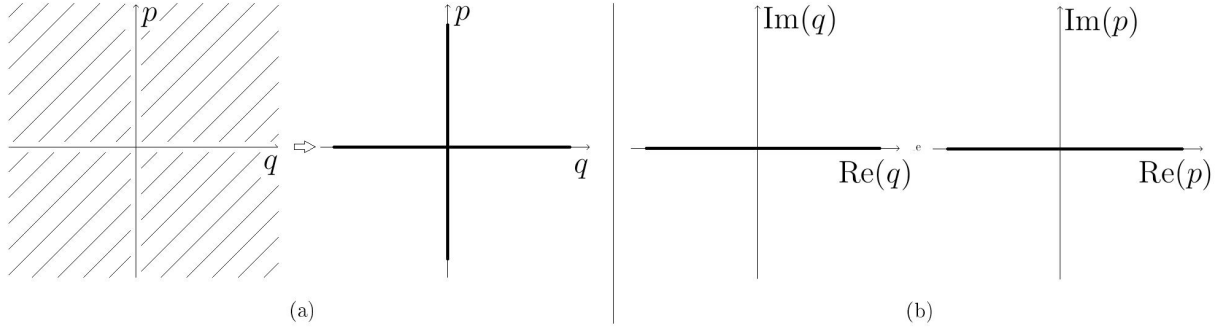


Figura 4.2: Ilustração da extensão das variáveis. Em (a), no lugar de calcular a integral em *todo* o plano complexo z , alteramos este cálculo para duas integrais de linha, percorrendo os caminhos ao longo dos eixos q e p , partes real e imaginária de z , respectivamente, representados pela linha grossa. Em (b), consideramos que q e p podem ser complexos, fato este que nos daria um espaço 4-dimensional, representados pelos dois planos complexos. Dessa forma, os caminhos de integração podem ser deformados, de acordo com o Teorema Integral de Cauchy.

Com a nova análise, fica claro que $u_{r,j}$ e $v_{r,j}$ são variáveis independentes, de tal maneira que $\delta u_{r,j}$ e $\delta v_{r,j}$ podem ser variações independentes, algo que não era possível sem levar em conta a extensão analítica de $z_{r,j}$ e $z_{r,j}^*$. Com isso, a equação anterior torna-se

$$-\tilde{v}_{r,k} + \tilde{v}_{r,k+1} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial \tilde{u}_{r,k}} \quad \text{e} \quad \tilde{u}_{r,k} - \tilde{u}_{r,k+1} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial \tilde{v}_{r,k+\frac{1}{2}}}, \quad (4.26)$$

para $k = 1, \dots, N-1$ na primeira equação e $k = 0, \dots, N-2$ na segunda. O $\tilde{\cdot}$ nas expressões representa aplicação nos caminhos críticos. No limite contínuo, tomamos $\epsilon \rightarrow 0$, obtendo

$$i\hbar \dot{\tilde{u}}_r = \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \tilde{v}_r} \quad \text{e} \quad -i\hbar \dot{\tilde{v}}_r = \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \tilde{u}_r}. \quad (4.27)$$

De acordo com a definição de $\tilde{\mathcal{H}}$, utilizada na eq. (4.7), no limite em questão, ele toma a forma

$$\tilde{\mathcal{H}} \equiv \langle \mathbf{z} | \mathcal{H} | \mathbf{z} \rangle \Big|_{\left\{ \begin{array}{l} z_{r,j} = u_{r,j} \\ z_{r,j}^* = v_{r,j} \end{array} \right\}} \equiv \langle \mathbf{v} | \mathcal{H} | \mathbf{u} \rangle. \quad (4.28)$$

Um detalhe importante é que os pontos $\tilde{\mathbf{u}}(T)$ e $\tilde{\mathbf{v}}(0)$ não são condições de contorno; tais pontos só são obtidos após a integração das equações de movimento. Isso ocorre porque $u_r(T)$ e $v_r(0)$ não aparecem nas eqs. (4.26). Se $z_r^*(0)$ e $z_r(T)$ aparecessem nas eqs. (4.26) na forma de $u_r(T) = z_r(T) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{q_r(T)}{b_r} + i \frac{p_r(T)}{c_r} \right]$ e $v_r(0) = z_r^*(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{q_r(0)}{b_r} - i \frac{p_r(0)}{c_r} \right]$, eliminaria-se a possibilidade de realizarmos a continuação analítica do espaço de fase,

uma vez que *todas* essas condições de contorno só seriam satisfeitas no caso em que \mathbf{p} e \mathbf{q} são reais, situação extremamente particular.

Podemos notar, então, que as trajetórias críticas, $\tilde{\mathbf{u}}(t)$ e $\tilde{\mathbf{v}}(t)$, são dadas pelas eqs. (4.27), com condições de contorno $\tilde{\mathbf{u}}(0) \equiv \mathbf{u}' = \mathbf{z}'$ e $\tilde{\mathbf{v}}(T) \equiv \mathbf{v}'' = \mathbf{z}''^*$, onde a linha (linha dupla) significa tempo inicial (tempo final).

É importante notar que, ao escrever as equações de movimento (4.27) nas variáveis \mathbf{p} e \mathbf{q} , elas se tornam as equações de Hamilton governadas por $\tilde{\mathcal{H}}$. Ou seja, a trajetória crítica é uma trajetória *clássica* de um sistema equivalente, governado pela Hamiltoniana $\tilde{\mathcal{H}}$.

A partir daqui, nesta dissertação, esperamos ter esclarecido o sentido de classificar trajetórias *reais* ou *complexas*. As primeiras referem-se àquelas que habitam o espaço de fase clássico real; são, portanto, muito específicas no nosso cenário, e, para elas, \mathbf{u} é complexo conjugado de \mathbf{v} , e vice-versa. Trajetórias complexas, por outro lado, habitam o espaço de fase estendido, e esta relação entre \mathbf{u} e \mathbf{v} deixa de valer.

4.4 Vizinhança da trajetória clássica complexa

Nas seções anteriores, mostramos quais são os caminhos que mais contribuem para a fórmula do propagador, que são trajetórias clássicas complexas, regidas pela eq. (4.27), com condições de contorno $\tilde{\mathbf{u}}(0) \equiv \mathbf{u}' = \mathbf{z}'$ e $\tilde{\mathbf{v}}(T) \equiv \mathbf{v}'' = \mathbf{z}''^*$. Aqui, mostraremos a contribuição de cada trajetória para o valor do propagador.

Primeiramente, expandimos \mathcal{F} em série de Taylor até segunda ordem: $\mathcal{F} \simeq \tilde{\mathcal{F}} + \delta\tilde{\mathcal{F}} + \frac{1}{2}\delta^2\tilde{\mathcal{F}}$, onde o til representa o valor calculado no ponto de sela. Segundo o método utilizado, exigimos $\delta\tilde{\mathcal{F}} = 0$. Utilizando então a expansão, o propagador fica

$$\mathcal{K}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) = \mathcal{I} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tilde{\mathcal{F}} \right], \quad \text{com} \quad \mathcal{I} = \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^2\mathbf{u}_j d^2\mathbf{v}_j}{-4\pi^2} \right) \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \delta^2\tilde{\mathcal{F}} \right]. \quad (4.29)$$

Mudamos a notação de K para \mathcal{K} , pois este agora é o propagador semiclássico. Portanto, o problema desta subseção trata de calcular a integral \mathcal{I} , que possui, da maneira como foi construída, a contribuição da vizinhança da trajetória crítica. Vamos analisar a variação em segunda ordem. Um detalhe importante é que a integral \mathcal{I} é convergente, pois, segundo [16], $\delta^2\tilde{\mathcal{F}}$ contém sempre uma parte imaginária diferente de zero e positiva, mesmo quando

a trajetória crítica é real. A partir da eq. (4.25),

$$\begin{aligned} \frac{i}{2\hbar} \delta^2 \tilde{\mathcal{F}} = & -\frac{1}{2} \sum_{r,r'=x,y} \left[\sum_{k=1}^{N-2} \left[2\mathcal{C}_{r,r'}^{k+1/2} \delta v_{r,k+1} \delta u_{r',k} - \delta v_{r,k+1} \delta u_{r,k} \right] \right. \\ & \left. + \sum_{k=1}^{N-1} \left[\mathcal{A}_{r,r'}^k \delta v_{r,k} \delta v_{r',k} + \mathcal{B}_{r,r'}^k \delta u_{r,k} \delta u_{r',k} + \delta v_{r,k} \delta u_{r,k} \right] \right], \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde

$$\mathcal{A}_{r,r'}^k = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}_{k-\frac{1}{2}}}{\partial \tilde{v}_{r,k} \partial \tilde{v}_{r',k}}, \quad \mathcal{B}_{r,r'}^k = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial \tilde{u}_{r,k} \partial \tilde{u}_{r',k}} \quad \text{e} \quad \mathcal{C}_{r,r'}^{k+1/2} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial \tilde{v}_{r,k+1} \partial \tilde{u}_{r',k}}, \quad (4.31)$$

todos calculados sobre a trajetória crítica. É possível notar, com o auxílio da eq. (4.30), que a integral \mathcal{I} que queremos calcular é do tipo gaussiana multidimensional. Então, podemos escrever

$$\frac{i}{2\hbar} \delta^2 \mathcal{F} = -\frac{1}{2} \mathbf{c}^T \mathbf{Q} \mathbf{c}, \quad (4.32)$$

onde \mathbf{c}^T é um vetor linha $4(N-1)$ -dimensional, transposto de \mathbf{c} , dado por

$$\mathbf{c}^T = (\delta u_{x,N-1} \quad \delta u_{y,N-1} \quad \delta v_{x,N-1} \quad \delta v_{y,N-1} \quad \cdots \quad \delta u_{x,1} \quad \delta u_{y,1} \quad \delta v_{x,1} \quad \delta v_{y,1}), \quad (4.33)$$

e a matriz \mathbf{Q} , de dimensão $4(N-1) \times 4(N-1)$, é dada por

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}^{N-1} & \mathbb{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \mathbb{1} & \mathbf{A}^{N-1} & \mathbf{C}^{N-3/2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \mathbf{C}^{T^{N-3/2}} & \mathbf{B}^{N-2} & \mathbb{1} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \mathbb{1} & \mathbf{A}^{N-2} & \mathbf{C}^{N-5/2} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{C}^{T^{N-5/2}} & \mathbf{B}^{N-3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad (4.34)$$

onde $\mathbb{1}$ é a matriz identidade 2×2 , e

$$\mathbf{A}^k = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_{xx}^k & \mathcal{A}_{xy}^k \\ \mathcal{A}_{yx}^k & \mathcal{A}_{yy}^k \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}^k = \begin{bmatrix} \mathcal{B}_{xx}^k & \mathcal{B}_{xy}^k \\ \mathcal{B}_{yx}^k & \mathcal{B}_{yy}^k \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C}^{k+1/2} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{xx}^{k+1/2} & \mathcal{C}_{xy}^{k+1/2} \\ \mathcal{C}_{yx}^{k+1/2} & \mathcal{C}_{yy}^{k+1/2} \end{bmatrix}. \quad (4.35)$$

O objetivo então é encontrar uma transformação unitária $\mathbf{U} \Rightarrow \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbb{1}$, de modo que a matriz transformada $\mathbf{Q}' = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{Q} \mathbf{U}$ seja diagonal. Com isso, obteríamos uma integral de variáveis separáveis, onde cada integral separada seria do tipo gaussiana, de resultado conhecido. Dessa maneira, de acordo com [16], utilizando a transformação em (4.32)

$$\int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{d^2 \mathbf{u}_j d^2 \mathbf{v}_j}{-4\pi^2} \right) \exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{c}^T \mathbf{Q} \mathbf{c} \right] = \sqrt{\frac{1}{\det \mathbf{Q}}}. \quad (4.36)$$

Na ref. [26] (apêndice A) apresenta-se o cálculo do determinante, o qual vale

$$\det \mathbf{Q} = [\det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_x \partial v_x} + \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_y \partial v_y} \right) dt \right], \quad (4.37)$$

onde $\mathbf{M}_{\mathbf{vv}}$ é o bloco 2×2 da matriz de monodromia \mathbf{M} , que é responsável pela propagação de pequenos deslocamentos $\delta \mathbf{u}'$ e $\delta \mathbf{v}'$, em torno da trajetória crítica, durante um tempo T :

$$\begin{bmatrix} \delta \mathbf{u}'' \\ \delta \mathbf{v}'' \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} \delta \mathbf{u}' \\ \delta \mathbf{v}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{\mathbf{uu}} & \mathbf{M}_{\mathbf{uv}} \\ \mathbf{M}_{\mathbf{vu}} & \mathbf{M}_{\mathbf{vv}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta \mathbf{u}' \\ \delta \mathbf{v}' \end{bmatrix}. \quad (4.38)$$

4.5 Ação complexa

Vamos analisar o termo $\exp \left[\frac{i}{\hbar} \tilde{\mathcal{F}} \right]$, que aparece na eq. (4.29). Por simplicidade, vamos ocultar o til em cima de \mathcal{F} , já que sabemos que qualquer função de $\mathbf{u}(t)$ e $\mathbf{v}(t)$ deve ser calculada sobre a trajetória crítica.

Para escrever \mathcal{F} utilizando a nova notação com u_r e v_r , devemos ter cuidado com alguns pontos. Como visto anteriormente, devido ao fato de que \mathbf{z}'^* e \mathbf{z}'' não aparecem nas equações de movimento (4.26), não os podemos substituir por \mathbf{v}' e \mathbf{u}'' , respectivamente. Vamos substituir diretamente os termos, como se estivessem corretos, e depois os subtrairemos para corrigir a expressão. O termo que contém \mathbf{v}' e \mathbf{u}'' é $-\frac{1}{2} \mathbf{v}' \cdot \mathbf{u}' - \frac{1}{2} \mathbf{v}'' \cdot \mathbf{u}''$, que deveria ser substituído por $-\frac{1}{2} \mathbf{z}'^* \cdot \mathbf{z}' - \frac{1}{2} \mathbf{z}''^* \cdot \mathbf{z}''$. Com isso, fazemos o limite $\epsilon \rightarrow 0$ para obter

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{F} = \int_0^T \left[\frac{1}{2} (\dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{u}}) - \frac{i}{\hbar} \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right] dt - \frac{1}{2} [|\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{v}''|^2 - \mathbf{u}' \cdot \mathbf{v}' - \mathbf{u}'' \cdot \mathbf{v}'']. \quad (4.39)$$

Definimos, então, a *ação complexa* \mathcal{S} como

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{S} = \int_0^T \left[\frac{1}{2} (\dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{u}}) - \frac{i}{\hbar} \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right] dt + \frac{1}{2} [\mathbf{u}' \cdot \mathbf{v}' + \mathbf{u}'' \cdot \mathbf{v}''], \quad (4.40)$$

nome este dado porque os resultados que são obtidos são equivalentes aos obtidos pela ação clássica usual:

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial v_r''} = -i\hbar u_r'', \quad \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial u_r'} = -i\hbar v_r' \quad \text{e} \quad \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial T} = -E = -\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{u}', \mathbf{v}') = -\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{u}'', \mathbf{v}''). \quad (4.41)$$

4.6 Fórmula para o propagador semiclássico

Aqui mostraremos a fórmula semiclássica para o propagador e um resumo das expressões importantes. Como resultado final, obtemos uma fórmula que é função somente de traje-

tórias clássicas complexas, que obedecem a determinadas condições de contorno. Alcançamos, portanto, a essência de uma fórmula semiclássica: realizar o cálculo aproximado de uma grandeza puramente quântica (o propagador) a partir do cálculo de grandezas clássicas (as trajetórias de um sistema clássico correspondente). A equação final para o propagador, construída a partir das eqs. (4.29), (4.36) e (4.39), se resume a

$$\mathcal{K}(\mathbf{z}''^*, \mathbf{z}', T) \approx \sum_{\text{traj.}} \sqrt{\frac{1}{\det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{F} \right]. \quad (4.42)$$

Na equação acima, \mathcal{F} e $\mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}$ são funções das trajetórias complexas $\mathbf{u}(t)$ e $\mathbf{v}(t)$, regidas pela Hamiltoniana suavizada $\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}(t)) \equiv \langle \mathbf{v} | \mathcal{H} | \mathbf{u} \rangle$ [16], com condições de contorno *mistas* $\mathbf{u}(0) \equiv \mathbf{u}' = \mathbf{z}'$ e $\mathbf{v}(T) \equiv \mathbf{v}'' = \mathbf{z}''^*$. O somatório indica que devemos considerar *todas* aquelas trajetórias que satisfazem as condições descritas acima. A dependência de $\mathcal{K}(\mathbf{z}''^*, \mathbf{z}', T)$ é escrita desta maneira por causa das eqs. (4.26): \mathbf{z}'' e \mathbf{z}'^* *não* aparecem nestas equações. É importante lembrar que \mathbf{u} e \mathbf{v} são variáveis auxiliares, cujas componentes u_r e v_r , com $r = x, y$ se relacionam com as componentes das variáveis *complexas* de posição e momentum, q_r e p_r , respectivamente, segundo

$$u_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_r}{b_r} + i \frac{p_r}{c_r} \right) \quad \text{e} \quad v_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_r}{b_r} - i \frac{p_r}{c_r} \right). \quad (4.43)$$

Como vimos no capítulo 2, b_r e c_r são as larguras dos estados coerentes $|z_r\rangle$ em relação à posição e ao *momentum* médios, respectivamente, com a condição de que $b_r c_r = \hbar$. Além disso, u_r e v_r satisfazem as equações de movimento

$$i\hbar \dot{u}_r = \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial v_r} \quad \text{e} \quad -i\hbar \dot{v}_r = \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_r}. \quad (4.44)$$

O objeto \mathcal{F} é dado por

$$\mathcal{F}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) = \mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) + \mathcal{G}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) + \frac{i\hbar}{2} [|\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{v}''|^2], \quad (4.45)$$

onde \mathcal{S} é a ação complexa da trajetória envolvida, e \mathcal{G} é uma correção, que provem do fato de utilizarmos uma Hamiltoniana suavizada no lugar da clássica [16]. As expressões para \mathcal{S} e \mathcal{G} são

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) &= \int_0^T \left[\frac{i\hbar}{2} (\dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{u}}) - \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right] dt - \frac{i\hbar}{2} [\mathbf{u}' \cdot \mathbf{v}' + \mathbf{u}'' \cdot \mathbf{v}''] \quad \text{e} \\ \mathcal{G}(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) &= \frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_x \partial v_x} + \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_y \partial v_y} \right) dt. \end{aligned} \quad (4.46)$$

4.7 Retro-propagador semiclássico em estados coerentes

Até o presente momento, sempre consideramos que T , o tempo de propagação, é maior que zero. É possível construir expressões generalizadas para tempos de propagação negativos também, como mostrado em [12]. Se fizermos a substituição $T \rightarrow -T$, o propagador será dado por

$$K(\mathbf{z}_2^*, \mathbf{z}_1, -T) = \left\langle \mathbf{z}_2 \left| \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} T \right) \right| \mathbf{z}_1 \right\rangle. \quad (4.47)$$

Matematicamente, este resultado nos diz que $K(\mathbf{z}_2^*, \mathbf{z}_1, -T) = K^*(\mathbf{z}_1^*, \mathbf{z}_2, T)$. Fisicamente, isto nos diz que, na eq. (4.47), o propagador é a amplitude de probabilidade de um estado inicialmente em $|\mathbf{z}_1\rangle$, evoluindo no sentido *negativo* do eixo temporal, ser encontrado em $|\mathbf{z}_2\rangle$. De forma análoga ao que fizemos neste capítulo, é possível obter uma expressão semiclássica para o retro-propagador quântico [12]. Adotando a notação K_ξ , em que $\xi = +1$ se refere ao propagador usual, e $\xi = -1$ ao retro-propagador, podemos escrever suas expressões semiclássicas como

$$\mathcal{K}_\xi(\mathbf{z}_2^*, \mathbf{z}_1, T) \approx \sum_{\text{traj.}} \sqrt{\mathcal{P}_\xi} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{F}_\xi \right], \quad (4.48)$$

com

$$\mathcal{F}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) = \mathcal{S}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) + \mathcal{G}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) + \frac{i\hbar}{2} [|\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{v}''|^2],$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) &= \xi \int_0^T \left[\frac{i\hbar}{2} (\dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{u}}) - \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right] dt - \frac{i\hbar}{2} [\mathbf{u}' \cdot \mathbf{v}' + \mathbf{u}'' \cdot \mathbf{v}''], \\ \mathcal{G}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) &= \frac{\xi}{2} \int_0^T \left(\frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_x \partial v_x} + \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_y \partial v_y} \right) dt. \end{aligned} \quad (4.49)$$

O pré-fator \mathcal{P}_ξ é dado por

$$\mathcal{P}_\xi = \begin{cases} (\det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^\xi)^{-1} & \text{para } \xi = +1 \\ (\det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^\xi)^{-1} & \text{para } \xi = -1. \end{cases} \quad (4.50)$$

As equações envolvidas no cálculo dos dois propagadores ($\xi = \pm 1$) são governadas pelas mesmas equações de movimento (4.27), entretanto possuem condições de contorno distintas, dadas pela eq. (19) de [12],

$$\begin{aligned} \mathbf{u}'_\xi &\equiv \mathbf{u}_\xi(0), & \mathbf{u}''_\xi &\equiv \mathbf{u}_\xi(T), \\ \mathbf{v}'_\xi &\equiv \mathbf{v}_\xi(0), & \mathbf{v}''_\xi &\equiv \mathbf{v}_\xi(T). \end{aligned} \quad (4.51)$$

Como se confirmará a seguir, a fórmula semiclássica \mathcal{K}_ξ será nossa principal ferramenta para encontrar uma expressão semiclássica para o emaranhamento.

Capítulo 5

Emaranhamento e entropia linear semiclássica

Uma das propriedades mais enigmáticas da mecânica quântica, a qual tem causado muitos questionamentos e estudos interessantes desde o século passado, é o *emaranhamento*. Tal característica, amplamente conhecida por não possuir um análogo clássico, foi alvo de estudos por Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen, em um artigo de 1935 [7]. Neste trabalho, utilizando determinadas premissas, em um sistema bipartido, os autores concluem que observáveis que não comutam podem ser simultaneamente *reais*. Como consequência, devido ao fato de que a mecânica quântica não prevê valores simultâneos para tais elementos de realidade, esta teoria foi classificada como incompleta; variáveis que seriam importantes para a descrição dos fenômenos estariam sendo desconsideradas no formalismo. Consideramos que o artigo em discussão é de enorme importância porque inaugurou o debate sobre propriedades incomuns encontradas na mecânica quântica. Em particular, para decifrar o enigma apresentado em [7], precisamos inevitavelmente passar pelo tema emaranhamento.

5.1 Quantificando emaranhamento

Nesta dissertação, estaremos interessados em estudar dinâmica de emaranhamento em sistemas *genéricos*, representados por estados puros bipartidos pertencentes ao espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y$. Todo estado $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$, que não puder ser fatorado como $|\psi(t)\rangle = |\psi_x(t)\rangle \otimes |\psi_y(t)\rangle$, com $|\psi_x(t)\rangle \in \mathcal{H}_x$ e $|\psi_y(t)\rangle \in \mathcal{H}_y$, é dito emaranhado.

Uma maneira de quantificar emaranhamento é através da *entropia linear* do estado reduzido $\rho_r(t) = \text{Tr}_{r'}(|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|)$, onde r e r' assumem x ou y , desde que $r \neq r'$. Podemos expressá-la da seguinte maneira [12]:

$$S_{\text{lin}}(\rho_r(t)) = 1 - P_t, \quad (5.1)$$

onde P_t é a *pureza* do estado reduzido

$$P_t = \text{Tr}_x [(\rho_x(t))^2] = \text{Tr}_y [(\rho_y(t))^2]. \quad (5.2)$$

Esta quantidade nos diz o quão “separável” a partição x é da partição y . Note que, como S_{lin} depende somente da pureza, se esta for igual à unidade, como acontece com um estado não-emaranhado (ou separável), a entropia linear se anula; à medida em que P_t diminui seu valor, a entropia linear aumenta, indicando que o estado começa a se emaranhar. Dada a relação simples entre S_{lin} e P_t , é suficiente aplicar o tratamento semiclássico apenas para a pureza do estado reduzido.

Como estado inicial, vamos considerar um estado coerente $|\mathbf{z}_0\rangle = |z_{0x}\rangle \otimes |z_{0y}\rangle$, sob o qual age um Hamiltoniano genérico \mathcal{H} , independente do tempo. Com isso, o operador densidade se escreve

$$\rho(t) = \mathcal{U} |\mathbf{z}_0\rangle \langle \mathbf{z}_0| \mathcal{U}^\dagger, \quad \text{sendo} \quad \mathcal{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t\right). \quad (5.3)$$

O operador densidade reduzido para a partição x se dá por

$$\rho_x(t) = \text{Tr}_y \rho(t) = \int \frac{d^2 z_y}{\pi} \langle z_y | \rho(t) | z_y \rangle = \int \frac{d^2 z_y}{\pi} \langle z_y | \mathcal{U} |\mathbf{z}_0\rangle \langle \mathbf{z}_0| \mathcal{U}^\dagger | z_y \rangle. \quad (5.4)$$

A pureza então se escreve

$$\begin{aligned} P_t = \text{Tr}_x [(\rho_x(t))^2] &= \int \frac{d^2 w_x}{\pi} \langle w_x | \rho_x^2(t) | w_x \rangle = \int \frac{d^2 w_x}{\pi} \langle w_x | \rho_x(t) \rho_x(t) | w_x \rangle \\ &= \int \frac{d^2 w_x}{\pi} \langle w_x | \left(\int \frac{d^2 z_y}{\pi} \langle z_y | \mathcal{U} |\mathbf{z}_0\rangle \langle \mathbf{z}_0| \mathcal{U}^\dagger | z_y \rangle \right) \left(\int \frac{d^2 w_y}{\pi} \langle w_y | \mathcal{U} |\mathbf{z}_0\rangle \langle \mathbf{z}_0| \mathcal{U}^\dagger | w_y \rangle \right) | w_x \rangle, \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde renomeamos a variável de integração na segunda integral de $\rho_x(t)$. Inserir uma

unidade $\mathbb{1} = \int \frac{d^2 z_x}{\pi} |z_x\rangle \langle z_x|$ entre as duas integrais nos dá

$$\begin{aligned}
P_t &= \int \frac{d^2 w_x}{\pi} \langle w_x | \left(\int \frac{d^2 z_y}{\pi} \langle z_y | \mathcal{U} | \mathbf{z}_0 \rangle \langle \mathbf{z}_0 | \mathcal{U}^\dagger | z_y \rangle \right) \mathbb{1} \\
&\quad \times \left(\int \frac{d^2 w_y}{\pi} \langle w_y | \mathcal{U} | \mathbf{z}_0 \rangle \langle \mathbf{z}_0 | \mathcal{U}^\dagger | w_y \rangle \right) | w_x \rangle \\
&= \int \frac{d^2 w_x}{\pi} \frac{d^2 z_x}{\pi} \langle w_x | \left(\int \frac{d^2 z_y}{\pi} \langle z_y | \mathcal{U} | \mathbf{z}_0 \rangle \langle \mathbf{z}_0 | \mathcal{U}^\dagger | z_y \rangle \right) \\
&\quad \times | z_x \rangle \langle z_x | \left(\int \frac{d^2 w_y}{\pi} \langle w_y | \mathcal{U} | \mathbf{z}_0 \rangle \langle \mathbf{z}_0 | \mathcal{U}^\dagger | w_y \rangle \right) | w_x \rangle \\
&= \int \frac{d^2 z_x}{\pi} \frac{d^2 z_y}{\pi} \frac{d^2 w_x}{\pi} \frac{d^2 w_y}{\pi} \langle w_x, z_y | \mathcal{U} | \mathbf{z}_0 \rangle \langle \mathbf{z}_0 | \mathcal{U}^\dagger | z_x, z_y \rangle \\
&\quad \times \langle z_x, w_y | \mathcal{U} | \mathbf{z}_0 \rangle \langle \mathbf{z}_0 | \mathcal{U}^\dagger | w_x, w_y \rangle.
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Os quatro termos que aparecem na integral nada mais são do que propagadores. Utilizando a notação K_ξ para propagadores e retro-propagadores apresentados na seção 4.7 [12]:

$$\begin{aligned}
K_+^{(1)}((w_x^*, z_y^*), \mathbf{z}_0, t) &= \langle w_x, z_y | \mathcal{U} | \mathbf{z}_0 \rangle; \\
K_-^{(2)}(\mathbf{z}_0^*, (z_x, z_y), t) &= \langle \mathbf{z}_0 | \mathcal{U}^\dagger | z_x, z_y \rangle; \\
K_+^{(3)}((z_x^*, w_y^*), \mathbf{z}_0, t) &= \langle z_x, w_y | \mathcal{U} | \mathbf{z}_0 \rangle; \\
K_-^{(4)}(\mathbf{z}_0^*, (w_x, w_y), t) &= \langle \mathbf{z}_0 | \mathcal{U}^\dagger | w_x, w_y \rangle;
\end{aligned} \tag{5.7}$$

o que, finalmente, nos dá

$$\begin{aligned}
P_t &= \int \frac{d^2 z_x}{\pi} \frac{d^2 z_y}{\pi} \frac{d^2 w_x}{\pi} \frac{d^2 w_y}{\pi} K_+^{(1)}((w_x^*, z_y^*), \mathbf{z}_0, t) K_-^{(2)}(\mathbf{z}_0^*, (z_x, z_y), t) \\
&\quad \times K_+^{(3)}((z_x^*, w_y^*), \mathbf{z}_0, t) K_-^{(4)}(\mathbf{z}_0^*, (w_x, w_y), t).
\end{aligned} \tag{5.8}$$

5.2 Fórmula semiclássica da pureza

A pureza envolve quatro propagadores diferentes, com parâmetros distintos. Podemos escrever a sua versão semiclássica ao substituir os propagadores quânticos $K_\xi(\mathbf{z}_2^*, \mathbf{z}_1, t)$ pelos seus respectivos propagadores semiclássicos, encontrando

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_t &= \int \frac{d^2 z_x}{\pi} \frac{d^2 z_y}{\pi} \frac{d^2 w_x}{\pi} \frac{d^2 w_y}{\pi} \\
&\quad \times \sum_{\text{traj. (1)}} \sum_{\text{traj. (2)}} \sum_{\text{traj. (3)}} \sum_{\text{traj. (4)}} \sqrt{\mathcal{P}_+^{(1)} \mathcal{P}_-^{(2)} \mathcal{P}_+^{(3)} \mathcal{P}_-^{(4)}} \exp \left[\sum_{i=1}^4 \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(i)} + \frac{i}{\hbar} \mathcal{G}^{(i)} + \Lambda^{(i)} \right) \right],
\end{aligned} \tag{5.9}$$

onde a dependência em cada função foi omitida por simplicidade. As funções \mathcal{S}_ξ e \mathcal{G}_ξ estão definidas nas eqs. (4.49), e \mathcal{P}_ξ em (4.50). Logo a seguir, voltaremos a escrever explicitamente tais dependências. Por clareza, deixaremos registradas aqui as condições

de contorno para cada uma das quatro trajetórias que contribuem para seus respectivos propagadores:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_1'' &= (w_x^*, z_y^*); & \mathbf{u}_1' &= \mathbf{z}_0; \\
\mathbf{v}_2' &= \mathbf{z}_0^*; & \mathbf{u}_2'' &= (z_x, z_y); \\
\mathbf{v}_3'' &= (z_x^*, w_y^*); & \mathbf{u}_3' &= \mathbf{z}_0; \\
\mathbf{v}_4' &= \mathbf{z}_0^*; & \mathbf{u}_4'' &= (w_x, w_y).
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Antes de prosseguir, consideramos pertinente trazer alguns esclarecimentos sobre a integral (5.9). São parâmetros de entrada para esta integral: \mathbf{z}_0 , que caracteriza o estado inicial, e t , o instante para o qual calculamos \mathcal{P}_t . A integral varre os planos complexos z_x , z_y , w_x e w_y . Para cada ponto pertencente ao espaço das variáveis de integração, note que definem-se completamente os quatro propagadores semiclássicos do integrando, conforme atesta a eq. (5.10), porque se completa a informação sobre quais trajetórias incluir. Além disso, pode ser que, fixadas as variáveis de integração, mais de uma trajetória contribua para o cálculo de um propagador; esta é a razão do somatório visto em (5.9).

Tendo em vista este esclarecimento, note que a integral em questão é praticamente impossível de se calcular, a menos que façamos alguma aproximação. Veja: integrar (5.9) significa, primeiro, fixar um ponto das variáveis de integração. Em seguida, somos capazes de determinar todas as trajetórias envolvidas no cálculo dos propagadores, e calcular o valor do integrando. Finalmente, devemos varrer todo espaço de integração, somando a contribuição de cada um de seus pontos. A aplicação do método do ponto de sela simplifica muito este procedimento, porque somente os pontos de sela das variáveis de integração serão relevantes. Como veremos a seguir, a condição de ponto de sela implicará imposições sobre as trajetórias. Mais especificamente, ela vai acoplar os pontos finais das trajetórias. Assim, somente os conjuntos de quatro trajetórias que cumpram tal requisito serão importantes para o cálculo.

Com isso, escreveremos aqui as funções $\Lambda^{(i)}$,

$$\begin{aligned}
\Lambda^{(1)} &= -\frac{1}{2} (|\mathbf{z}_0|^2 + |w_x|^2 + |z_y|^2); & \Lambda^{(2)} &= -\frac{1}{2} (|\mathbf{z}_0|^2 + |z_x|^2 + |z_y|^2); \\
\Lambda^{(3)} &= -\frac{1}{2} (|\mathbf{z}_0|^2 + |z_x|^2 + |w_y|^2); & \Lambda^{(4)} &= -\frac{1}{2} (|\mathbf{z}_0|^2 + |w_x|^2 + |w_y|^2),
\end{aligned} \tag{5.11}$$

e as dependências das funções $\mathcal{S}^{(i)}$ e $\mathcal{G}^{(i)}$, que serão importantes ao calcular a pureza semiclássica:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}^{(1)}((w_x^*, z_y^*), \mathbf{z}_0, t), & \mathcal{G}^{(1)}((w_x^*, z_y^*), \mathbf{z}_0, t); & \mathcal{S}^{(2)}(\mathbf{z}_0^*, (z_x, z_y), t), & \mathcal{G}^{(2)}(\mathbf{z}_0^*, (z_x, z_y), t); \\
\mathcal{S}^{(3)}((z_x^*, w_y^*), \mathbf{z}_0, t), & \mathcal{G}^{(3)}((z_x^*, w_y^*), \mathbf{z}_0, t); & \mathcal{S}^{(4)}(\mathbf{z}_0^*, (w_x, w_y), t), & \mathcal{G}^{(4)}(\mathbf{z}_0^*, (w_x, w_y), t).
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Para aplicar o método de ponto de sela na integral (5.9), visto no capítulo 4, iremos expandir $\phi \equiv \sum_{i=1}^4 \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(i)} + \Lambda^{(i)} \right)$. Não consideramos as funções $\mathcal{G}^{(i)}$ pelo fato de elas serem de ordem mais alta em \hbar [16]¹. A equação $\nabla\phi = 0$ nos fornece os pontos de sela, onde as derivadas são em relação às oito variáveis de integração da pureza (5.9): $w_x, w_y, z_x, z_y, w_x^*, w_y^*, z_x^*, z_y^*$. Obtemos o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\tilde{w}_x} \left(-|\tilde{w}_x|^2 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(4)} \right) &= -\tilde{w}_x^* + \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\tilde{w}_x} \mathcal{S}^{(4)} = 0; \\
\frac{d}{d\tilde{w}_x^*} \left(-|\tilde{w}_x|^2 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(1)} \right) &= -\tilde{w}_x + \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\tilde{w}_x^*} \mathcal{S}^{(1)} = 0; \\
\frac{d}{d\tilde{z}_x} \left(-|\tilde{z}_x|^2 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(2)} \right) &= -\tilde{z}_x^* + \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\tilde{z}_x} \mathcal{S}^{(2)} = 0; \\
\frac{d}{d\tilde{z}_x^*} \left(-|\tilde{z}_x|^2 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(3)} \right) &= -\tilde{z}_x + \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\tilde{z}_x^*} \mathcal{S}^{(3)} = 0; \\
\frac{d}{d\tilde{w}_y} \left(-|\tilde{w}_y|^2 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(4)} \right) &= -\tilde{w}_y^* + \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\tilde{w}_y} \mathcal{S}^{(4)} = 0; \\
\frac{d}{d\tilde{w}_y^*} \left(-|\tilde{w}_y|^2 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(3)} \right) &= -\tilde{w}_y + \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\tilde{w}_y^*} \mathcal{S}^{(3)} = 0; \\
\frac{d}{d\tilde{z}_y} \left(-|\tilde{z}_y|^2 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(2)} \right) &= -\tilde{z}_y^* + \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\tilde{z}_y} \mathcal{S}^{(2)} = 0; \\
\frac{d}{d\tilde{z}_y^*} \left(-|\tilde{z}_y|^2 + \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(1)} \right) &= -\tilde{z}_y + \frac{i}{\hbar} \frac{d}{d\tilde{z}_y^*} \mathcal{S}^{(1)} = 0.
\end{aligned} \tag{5.13}$$

O til sobre as variáveis foi inserido para indicar que tratam-se dos pontos de sela do integrando. Para calcular as derivadas das ações $\mathcal{S}^{(i)}$, utilizamos o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned}
u''_{r,i} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial v''_{r,i}} \mathcal{S}^{(i)}, & v'_{r,i} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial u'_{r,i}} \mathcal{S}^{(i)}, & \text{para } i = 1, 3 \text{ e } r = x, y; \\
u'_{r,i} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial v'_{r,i}} \mathcal{S}^{(i)}, & v''_{r,i} &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial u''_{r,i}} \mathcal{S}^{(i)}, & \text{para } i = 2, 4 \text{ e } r = x, y,
\end{aligned} \tag{5.14}$$

onde i indica a trajetória à qual $u_{r,i}$ e $v_{r,i}$ pertencem, que foram deduzidas na referência [12]. Lembramos que o símbolo de linha (linha dupla) se refere a tempo inicial (final). Aplicando as eqs. (5.14), encontramos

$$\begin{aligned}
\tilde{w}_x &= u''_{x,1}; & \tilde{w}_y &= u''_{y,3}; & \tilde{z}_x &= u''_{x,3}; & \tilde{z}_y &= u''_{y,1}; \\
\tilde{w}_x^* &= v''_{x,4}; & \tilde{w}_y^* &= v''_{y,4}; & \tilde{z}_x^* &= v''_{x,2}; & \tilde{z}_y^* &= v''_{y,2}.
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Assim, temos as condições de contorno originais, dadas em (5.10), provenientes das expressões para os propagadores, acrescidas das condições obtidas a partir dos pontos de

¹Note que, como \mathcal{G} envolve $\frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_r \partial v_r}$, e cada uma das variáveis u_r e v_r depende de $\frac{1}{\sqrt{\hbar}}$, este termo é de ordem \hbar^1 . Da mesma maneira, o termo \mathcal{S} é da ordem de $\sqrt{\hbar}$.

sela:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_1'' &= (\tilde{w}_x^*, \tilde{z}_y^*); & \mathbf{u}_1' &= \mathbf{z}_0; & \mathbf{u}_1'' &= (\tilde{w}_x, \tilde{z}_y); \\
\mathbf{v}_2' &= \mathbf{z}_0^*; & \mathbf{u}_2'' &= (\tilde{z}_x, \tilde{z}_y); & \mathbf{v}_2'' &= (\tilde{z}_x^*, \tilde{z}_y^*); \\
\mathbf{v}_3'' &= (\tilde{z}_x^*, \tilde{w}_y^*); & \mathbf{u}_3' &= \mathbf{z}_0; & \mathbf{u}_3'' &= (\tilde{z}_x, \tilde{w}_y); \\
\mathbf{v}_4' &= \mathbf{z}_0^*; & \mathbf{u}_4'' &= (\tilde{w}_x, \tilde{w}_y); & \mathbf{v}_4'' &= (\tilde{w}_x^*, \tilde{w}_y^*).
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Se observarmos a primeira linha desta equação, somos levados a concluir que $\mathbf{v}_1'' = \mathbf{u}_1''^*$, implicando que o ponto final da trajetória envolvida em \mathcal{K}_1 é real, ou seja, posição e *momentum* finais são variáveis reais. Pode-se mostrar [12] que, se, para algum instante de tempo, a trajetória mostra-se real, então ela assim será para qualquer outro instante de tempo. Estendendo este argumento às outras três trajetórias, conclui-se que a pureza semiclássica depende exclusivamente de um conjunto de quatro trajetórias *reais*, oriundas de uma descrição clássica do problema. Além disso, ao analisar as condições de contorno iniciais destas trajetórias, notamos que as quatro são as mesmas; todas partem do ponto $\mathbf{u}' = \mathbf{z}_0$ e $\mathbf{v}' = \mathbf{z}_0^*$. Este conjunto de trajetórias contribuintes foi chamado de conjunto trivial de trajetórias pelos autores de [12], onde não foi admitido nenhum outro ponto de sela para o cálculo de (5.9).

Dessa forma, dando continuidade ao cálculo da integral (5.9), é possível mostrar que a pureza semiclássica, para o caso em questão, se escreve como,

$$\mathcal{P}_t = \varepsilon^{-1/2} \det \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{uu}} \det \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{vv}}, \tag{5.17}$$

sendo

$$\begin{aligned}
\varepsilon &= \varepsilon' + \left(\left(\det \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{uu}} \det \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{vv}} - \det \tilde{\mathbf{A}} \det \tilde{\mathbf{B}} \right) \left(\det \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{uu}} \det \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{vv}} - \det \tilde{\mathbf{C}} \det \tilde{\mathbf{D}} \right) - \varepsilon'' \right)^2, \\
\varepsilon' &= -4 \left(\det \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{uu}} \det \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{vv}} - \det \tilde{\mathbf{A}}' \det \tilde{\mathbf{B}}' \right)^2 \\
\varepsilon'' &= \left(\det \tilde{\mathbf{A}}' \right)^2 \det \tilde{\mathbf{B}} \det \tilde{\mathbf{D}} - \left(\det \tilde{\mathbf{A}}' \det \tilde{\mathbf{B}}' \right)^2 + \left(\det \tilde{\mathbf{B}}' \right)^2 \det \tilde{\mathbf{A}} \det \tilde{\mathbf{C}},
\end{aligned} \tag{5.18}$$

com as matrizes auxiliares definidas por

$$\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{A}} & \tilde{\mathbf{D}} \\ \tilde{\mathbf{C}} & \tilde{\mathbf{B}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{M}} \quad \text{e} \quad \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{A}}' & \tilde{\mathbf{D}}' \\ \tilde{\mathbf{C}}' & \tilde{\mathbf{B}}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{M}}. \tag{5.19}$$

A matriz de monodromia, neste caso, é igual para todas as trajetórias. Dado o desfecho do presente cálculo, com apenas um conjunto de trajetórias contribuinte, salientamos que o

somatório sobre trajetórias, explícito em (5.9), torna-se desnecessário, por isso o deixamos de lado nesta seção.

O resultado apresentado aqui, derivado em [12], leva em consideração as condições de contorno (5.16), admitindo-que a variável z_x^* é complexo conjugado de z_x (e o equivalente para z_y , w_x e w_y). Entretanto, em consonância com as aproximações realizadas sobre os propagadores no capítulo 4, é permitido fazer extensões analíticas apropriadas de forma que a relação aqui citada entre z_x e z_x^* (e equivalentemente para as outras variáveis) não valha mais. Este procedimento é detalhado a seguir e resulta na possibilidade de incluir novos conjuntos de trajetórias, além do trivial, no cálculo de \mathcal{P}_t .

5.3 Fórmula semiclássica da pureza revisitada

Nesta seção, apresentaremos nossa primeira contribuição, ao revisitarmos os resultados mostrados na seção anterior, obtidos em [12]. Antes de recalcular a integral (5.9), faremos uma releitura das condições de contorno (5.16), levando em consideração a extensão analítica anunciada no final da última seção. Um conjunto de quatro trajetórias envolvidas no cálculo semiclássico da pureza é tal que suas condições de contorno iniciais permanecem

$$\mathbf{u}'_1 = \mathbf{u}'_3 = \mathbf{z}_0 \quad \text{e} \quad \mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}'_4 = \mathbf{z}_0^*. \quad (5.20)$$

Por outro lado, as condições de contorno finais, obtidas após a aplicação de (5.13), podem ser reescritas como

$$\begin{aligned} v''_{x,1} &= v''_{x,4}, & v''_{y,1} &= v''_{y,2}, & v''_{x,3} &= v''_{x,2}, & v''_{y,3} &= v''_{y,4}, \\ u''_{x,1} &= u''_{x,4}, & u''_{y,1} &= u''_{y,2}, & u''_{x,3} &= u''_{x,2}, & u''_{y,3} &= u''_{y,4}, \end{aligned} \quad (5.21)$$

que são lidas diretamente de (5.16), sem contudo admitir que o complexo conjugado de w_x é w_x^* , e assim por diante para todas as variáveis. Curiosamente, podemos interpretar este resultado da seguinte maneira. A expressão para a pureza semiclássica \mathcal{P}_t depende de conjuntos de quatro trajetórias que devem respeitar condições de contorno finais “emaranhadas”², como é evidente a partir das últimas equações. Por exemplo, no instante final, a componente v''_x da trajetória 1 deve ter o mesmo valor que a componente v''_x da trajetória 4. Por outro lado, a componente v''_y da trajetória 1 deve se igualar a v''_y da

²A conotação utilizada aqui é diferente da definição de emaranhamento dada anteriormente. O que queremos dizer é que as condições de contorno estão *embaralhadas* entre si, como explicado logo a seguir.

trajetória 2, e assim por diante. Obviamente, o conjunto trivial de trajetórias satisfaz todas essas condições, restando-nos a tarefa de mostrar que existem outros conjuntos de trajetórias que respeitem estas condições. No capítulo seguinte, para um Hamiltoniano específico, ilustraremos este fato.

Retornando ao cálculo de (5.9), dada esta nova discussão, em primeiro lugar a reescrevemos, para enfatizar a extensão analítica, como

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_t = \sum_{\text{traj.}} \int \frac{du''_{x,2} dv''_{x,3}}{-4\pi^2} \frac{du''_{y,2} dv''_{y,1}}{-4\pi^2} \frac{du''_{x,4} dv''_{x,1}}{-4\pi^2} \frac{du''_{y,4} dv''_{y,3}}{-4\pi^2} \sqrt{\mathcal{P}_+^{(1)} \mathcal{P}_-^{(2)} \mathcal{P}_+^{(3)} \mathcal{P}_-^{(4)}} \\ \times \exp \left[\sum_{i=1}^4 \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(i)} + \frac{i}{\hbar} \mathcal{G}^{(i)} + \Lambda^{(i)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Da mesma maneira, reescrevemos as funções $\Lambda^{(i)}$, dadas em (5.11), agora em termos de \mathbf{u}_i e \mathbf{v}_i ,

$$\begin{aligned} \Lambda^{(1)} &= -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + u''_{x,4} v''_{x,1} + u''_{y,2} v''_{y,1} \right); & \Lambda^{(2)} &= -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + u''_{x,2} v''_{x,3} + u''_{y,2} v''_{y,1} \right); \\ \Lambda^{(3)} &= -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + u''_{x,2} v''_{x,3} + u''_{y,4} v''_{y,3} \right); & \Lambda^{(4)} &= -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + u''_{x,4} v''_{x,1} + u''_{y,4} v''_{y,3} \right), \end{aligned} \quad (5.23)$$

e as novas dependências das funções $\mathcal{S}^{(i)}$ e $\mathcal{G}^{(i)}$, dadas em (5.12):

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^{(1)}((v''_{x,1}, v''_{y,1}), \mathbf{z}_0, t), & \quad \mathcal{G}^{(1)}((v''_{x,1}, v''_{y,1}), \mathbf{z}_0, t); \\ \mathcal{S}^{(2)}(\mathbf{z}_0^*, (u''_{x,2}, u''_{y,2}), t), & \quad \mathcal{G}^{(2)}(\mathbf{z}_0^*, (u''_{x,2}, u''_{y,2}), t); \\ \mathcal{S}^{(3)}((v''_{x,3}, v''_{y,3}), \mathbf{z}_0, t), & \quad \mathcal{G}^{(3)}((v''_{x,3}, v''_{y,3}), \mathbf{z}_0, t); \\ \mathcal{S}^{(4)}(\mathbf{z}_0^*, (u''_{x,4}, u''_{y,4}), t), & \quad \mathcal{G}^{(4)}(\mathbf{z}_0^*, (u''_{x,4}, u''_{y,4}), t). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Precisamos então expandir em série de Taylor até segunda ordem, como dito na seção anterior, a função $\phi = \sum_j \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}^{(j)} + \Lambda^{(j)} \right)$, escrita em termos de \mathbf{u}_j e \mathbf{v}_j , em torno dos pontos de sela $\tilde{\mathbf{c}}^T = (\tilde{v}''_{x,1}, \tilde{v}''_{y,1}, \tilde{u}''_{x,2}, \tilde{u}''_{y,2}, \tilde{v}''_{x,3}, \tilde{v}''_{y,3}, \tilde{u}''_{x,4}, \tilde{u}''_{y,4})$. Não levamos em conta nesta expansão \mathcal{G} por ser de ordem mais alta em \hbar . A expansão é dada por $\phi \approx \tilde{\phi} + \tilde{\phi}_{\text{pri}} + \frac{1}{2} \tilde{\phi}_{\text{seg}}$, e o til significa que estamos calculando as funções nos pontos de sela.

Por construção, o termo de primeira ordem, $\tilde{\phi}_{\text{pri}}$, é nulo, sendo este justamente a definição dos pontos de sela. O termo de ordem zero é trivial. O termo de segunda ordem precisa de certa atenção. Sua expressão é dada por

$$\tilde{\phi}_{\text{seg}} = \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\tilde{\mathbf{c}}} (x_i - \tilde{x}_i) (x_j - \tilde{x}_j) = \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\tilde{\mathbf{c}}} \delta x_i \delta x_j,$$

sendo x_i as diversas componentes de \mathbf{c} , e $\delta x_i = x_i - \tilde{x}_i$. Calculando então $\tilde{\phi}_{\text{seg}}$:

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_{\text{seg}} = & \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(1)}}{\partial (\tilde{v}_{x,1}'')^2} \delta(\tilde{v}_{x,1}'')^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(1)}}{\partial (\tilde{v}_{y,1}'')^2} \delta(\tilde{v}_{y,1}'')^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(2)}}{\partial (\tilde{u}_{x,2}'')^2} \delta(\tilde{u}_{x,2}'')^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(2)}}{\partial (\tilde{u}_{y,2}'')^2} \delta(\tilde{u}_{y,2}'')^2 \\ & + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(3)}}{\partial (\tilde{v}_{x,3}'')^2} \delta(\tilde{v}_{x,3}'')^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(3)}}{\partial (\tilde{v}_{y,3}'')^2} \delta(\tilde{v}_{y,3}'')^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(4)}}{\partial (\tilde{u}_{x,4}'')^2} \delta(\tilde{u}_{x,4}'')^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(4)}}{\partial (\tilde{u}_{y,4}'')^2} \delta(\tilde{u}_{y,4}'')^2 \\ & + \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}^{(1)}}{\partial \delta \tilde{v}_{x,1}'' \partial \delta \tilde{v}_{y,1}''} + \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}^{(2)}}{\partial \delta \tilde{u}_{x,2}'' \partial \delta \tilde{u}_{y,2}''} + \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}^{(3)}}{\partial \delta \tilde{v}_{x,3}'' \partial \delta \tilde{v}_{y,3}''} + \frac{2i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}^{(4)}}{\partial \delta \tilde{u}_{x,4}'' \partial \delta \tilde{u}_{y,4}''} \\ & - 2\delta \tilde{u}_{x,4}'' \delta \tilde{v}_{x,1}'' - 2\delta \tilde{u}_{y,2}'' \delta \tilde{v}_{y,1}'' - 2\delta \tilde{u}_{x,2}'' \delta \tilde{v}_{x,3}'' - 2\delta \tilde{u}_{y,2}'' \delta \tilde{v}_{y,1}''.\end{aligned}$$

Desta maneira, a pureza se escreve

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_t = & \sum_{\text{traj.}} \int \frac{du_{x,2}'' dv_{x,3}''}{-4\pi^2} \frac{du_{y,2}'' dv_{y,1}''}{-4\pi^2} \frac{du_{x,4}'' dv_{x,1}''}{-4\pi^2} \frac{du_{y,4}'' dv_{y,3}''}{-4\pi^2} \sqrt{\tilde{\mathcal{P}}_+^{(1)} \tilde{\mathcal{P}}_-^{(2)} \tilde{\mathcal{P}}_+^{(3)} \tilde{\mathcal{P}}_-^{(4)}} \\ & \times \exp \left(\tilde{\phi} + \frac{1}{2} \phi_{\text{seg}} + \frac{i}{\hbar} \sum_i \tilde{\mathcal{G}}^{(i)} \right) \\ = & \sum_{\text{traj.}} \tilde{\mathcal{P}}_{\text{sc}} \exp \left(\tilde{\phi} + \frac{i}{\hbar} \sum_i \tilde{\mathcal{G}}^{(i)} \right) \\ & \times \int \frac{du_{x,2}'' dv_{x,3}''}{-4\pi^2} \frac{du_{y,2}'' dv_{y,1}''}{-4\pi^2} \frac{du_{x,4}'' dv_{x,1}''}{-4\pi^2} \frac{du_{y,4}'' dv_{y,3}''}{-4\pi^2} \exp \left(\frac{1}{2} \phi_{\text{seg}} \right),\end{aligned}\tag{5.25}$$

onde $\tilde{\mathcal{P}}_{\text{sc}} \equiv \sqrt{\tilde{\mathcal{P}}_+^{(1)} \tilde{\mathcal{P}}_-^{(2)} \tilde{\mathcal{P}}_+^{(3)} \tilde{\mathcal{P}}_-^{(4)}}$ é chamado de *pré-fator*. O fator \mathcal{G} volta a ser incluído para a fórmula da pureza por ser um termo importante para tal cálculo, embora não o seja para a localização dos pontos de sela [16].

De acordo com a eq. (4.36), se for possível escrever $\frac{1}{2} \phi_{\text{seg}} = -\frac{1}{2} \mathbf{c}^T \mathbf{Q} \mathbf{c}$, o resultado da integral acima se torna conhecido. Essa transformação é possível, se escrevermos \mathbf{Q} como sendo

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\mathbf{v}''\mathbf{v}''}^{(1)} & -\mathbb{1}_y & 0 & -\mathbb{1}_x \\ -\mathbb{1}_y & \frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}''}^{(2)} & -\mathbb{1}_x & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_x & \frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\mathbf{v}''\mathbf{v}''}^{(3)} & -\mathbb{1}_y \\ -\mathbb{1}_x & 0 & -\mathbb{1}_y & \frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}''}^{(4)} \end{bmatrix},\tag{5.26}$$

onde

$$\mathbb{1}_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbb{1}_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},\tag{5.27}$$

e os termos da diagonal, matrizes 2×2 , são as derivadas da ação em relação às variáveis \mathbf{u} e \mathbf{v} :

$$\frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\mathbf{v}''\mathbf{v}''}^{(i)} = \frac{i}{\hbar} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(i)}}{\partial \tilde{v}_x \partial \tilde{v}_x} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(i)}}{\partial \tilde{v}_x \partial \tilde{v}_y} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(i)}}{\partial \tilde{v}_y \partial \tilde{v}_x} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(i)}}{\partial \tilde{v}_y \partial \tilde{v}_y} \end{bmatrix} \text{ e } \frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}''}^{(i)} = \frac{i}{\hbar} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(i)}}{\partial \tilde{u}_x \partial \tilde{u}_x} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(i)}}{\partial \tilde{u}_x \partial \tilde{u}_y} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(i)}}{\partial \tilde{u}_y \partial \tilde{u}_x} & \frac{\partial^2 \mathcal{S}^{(i)}}{\partial \tilde{u}_y \partial \tilde{u}_y} \end{bmatrix}.\tag{5.28}$$

As matrizes das derivadas de $\mathcal{S}^{(i)}$ podem ser escritas de uma maneira mais interessante computacionalmente em função dos elementos da matriz de monodromia, definida na eq. (4.38) [12]:

$$\frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\mathbf{v}''\mathbf{v}'''}^{(i)} = \mathbf{M}_{\mathbf{uv}}^{(i)} \left(\mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(i)} \right)^{-1} \quad \text{e} \quad \frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\mathbf{u}''\mathbf{u}'''}^{(i)} = \mathbf{M}_{\mathbf{vu}}^{(i)} \left(\mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(i)} \right)^{-1}. \quad (5.29)$$

Resumindo, a pureza se escreve, utilizando a eq. (4.50) para expressar o pré-fator $\tilde{\mathcal{P}}_{\text{sc}}$, como

$$\mathcal{P}_t = \sum_{\text{traj.}} \frac{\exp \left(\tilde{\phi} + \frac{i}{\hbar} \sum_i \tilde{\mathcal{G}}^{(i)} \right)}{\sqrt{\det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(2)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(4)} \det \mathbf{Q}}} = \sum_{\text{traj.}} \frac{\exp \left(\tilde{\phi} + \frac{i}{\hbar} \sum_i \tilde{\mathcal{G}}^{(i)} \right)}{\sqrt{\mathcal{Y}}}. \quad (5.30)$$

A função $\mathcal{Y} = \det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(2)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(4)} \det \mathbf{Q}$ é dada, após longa manipulação, por

$$\begin{aligned} \mathcal{Y} = & + \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(2)} - \det \mathbf{B}^{(1)} \det \mathbf{A}^{(2)} \right) \times \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(4)} - \det \mathbf{B}^{(3)} \det \mathbf{A}^{(4)} \right) \\ & + \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{uv}}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{vu}}^{(2)} - \det \mathbf{D}^{(1)} \det \mathbf{C}^{(2)} \right) \times \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{uv}}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{vu}}^{(4)} - \det \mathbf{D}^{(3)} \det \mathbf{C}^{(4)} \right) \\ & - \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(1)} \det \mathbf{C}^{(2)} - \det \mathbf{B}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{vu}}^{(2)} \right) \times \left(\det \mathbf{D}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(4)} - \det \mathbf{M}_{\mathbf{uv}}^{(3)} \det \mathbf{A}^{(4)} \right) \\ & - \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{uv}}^{(1)} \det \mathbf{A}^{(2)} - \det \mathbf{D}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}}^{(2)} \right) \times \left(\det \mathbf{B}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{vu}}^{(4)} - \det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}}^{(3)} \det \mathbf{C}^{(4)} \right) \\ & - \det \mathbf{D}'^{(1)} \det \mathbf{C}'^{(2)} \det \mathbf{D}'^{(3)} \det \mathbf{C}'^{(4)} - \det \mathbf{B}'^{(1)} \det \mathbf{A}'^{(2)} \det \mathbf{B}'^{(3)} \det \mathbf{A}'^{(4)}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

cuja forma acreditamos ser mais apropriada para cálculo numérico. Nesta expressão, definimos as seguintes matrizes auxiliares:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{D} \\ \mathbf{C} & \mathbf{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{M}} \quad \text{e} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{A}' & \mathbf{D}' \\ \mathbf{C}' & \mathbf{B}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{M}}. \quad (5.32)$$

A pureza semiclássica, dada pela eq. (5.30), envolve trajetórias clássicas *complexas* no seu cálculo, sendo então uma extensão do resultado obtido na eq. (5.17), que reproduz o resultado de [12]. Como consideramos, além da trajetória trivial descrita anteriormente, trajetórias complexas, precisamos somar sobre *todos* os conjuntos de quatro trajetórias que satisfaçam as eqs. (5.20) e (5.21). Assim, em princípio, podemos obter resultados que mais se aproximam dos resultados quânticos exatos. Uma aplicação destes resultados será realizada no próximo capítulo.

Capítulo 6

Aplicação: osciladores harmônicos acoplados

Como estudo de caso, iremos realizar uma aplicação do método discutido anteriormente em um sistema formado por osciladores harmônicos acoplados não-linearmente [12], cujo Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathbb{1}_y + \mathbb{1}_x \otimes \mathcal{H}_y + \lambda \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y, \quad (6.1)$$

onde

$$\mathcal{H}_r = \frac{P_r^2}{2m_r} + \frac{m_r \omega_r^2 Q_r^2}{2}, \quad (6.2)$$

em que $r = x, y$ designa as partições do problema. Q_r (P_r) é o operador de posição (*momentum*) da partição r , e λ é a intensidade da interação, sendo $\lambda = 0$ o caso onde os dois osciladores não estão acoplados. Podemos interpretar este sistema como uma única partícula oscilando em duas dimensões, ou dois osciladores diferentes. O estado inicial será $|\mathbf{z}_0\rangle = |z_{0,x}\rangle \otimes |z_{0,y}\rangle$, conforme nossa prescrição. Podemos escrever a eq. (6.1) em função de a_r e a_r^\dagger (eq. (2.10)), que nos será mais útil devido às propriedades algébricas dos estados coerentes. Usamos as mesmas definições de b e c utilizadas anteriormente, com o detalhe que há um b_r e um c_r para cada partição, dados por $b_r = \sqrt{\hbar/(m_r \omega_r)}$ e $c_r = \sqrt{\hbar m_r \omega_r}$. Assim, obtemos:

$$\mathcal{H} = \hbar \Omega_x a_x^\dagger a_x \otimes \mathbb{1}_y + \hbar \Omega_y \mathbb{1}_x \otimes a_y^\dagger a_y + \hbar \Gamma a_x^\dagger a_x \otimes a_y^\dagger a_y + \epsilon_0, \quad (6.3)$$

onde $\Omega_r = \omega_r + \Gamma/2$, $\Gamma = \lambda \hbar \omega_x \omega_y$, e $\epsilon_0 = \hbar(\omega_x + \omega_y)/2$.

6.1 Cálculo quântico exato

Para testarmos a nossa aproximação, devemos compará-la com o resultado quântico. Seu cálculo é relativamente fácil, mas consideramos necessária a sua apresentação. O Hamiltoniano é dado pela eq. (6.1), com estado inicial $|\mathbf{z}_0\rangle$. O estado num tempo t qualquer será dado, através da aplicação do operador de evolução, por

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \mathcal{U} |\mathbf{z}_0\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right) |\mathbf{z}_0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_x t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_y t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\lambda\mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y t\right) \\
&\quad \times \left(\exp\left(-\frac{1}{2}|\mathbf{z}_0|^2\right) \sum_{n,m} \frac{z_{0x}^n z_{0y}^m}{\sqrt{n!m!}} |n, m\rangle \right) \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\mathbf{z}_0|^2\right) \sum_{n,m} \frac{z_{0x}^n z_{0y}^m}{\sqrt{n!m!}} |n, m\rangle \\
&\quad \times \exp\left(-i \left(\omega_x n + \omega_y m + \Gamma \left(\frac{n+m}{2} \right) + \Gamma n m + \underbrace{\frac{\omega_x + \omega_y}{2}}_{\sigma} \right) t \right) \\
&= \exp\left(-i\sigma t - \frac{1}{2}|\mathbf{z}_0|^2\right) \sum_{n,m} \frac{z_{0x}^n \exp\left(-i \left(\omega_x n + \Gamma \frac{n}{2} \right) t\right)}{\sqrt{n!}} \\
&\quad \times \frac{z_{0y}^m \exp\left(-i \left(\omega_y m + \Gamma \frac{m}{2} \right) t\right)}{\sqrt{m!}} \exp(-i\Gamma n m t) |n, m\rangle \\
&= \exp\left(-i\sigma t - \frac{1}{2}|\mathbf{z}_0|^2\right) \sum_{n,m} \frac{(z_{0x}(t))^n}{\sqrt{n!}} \frac{(z_{0y}(t))^m}{\sqrt{m!}} \exp(-i\Gamma n m t) |n, m\rangle,
\end{aligned} \tag{6.4}$$

sendo $z_{0r}(t) \equiv z_{0r} \exp\left(-i \left(\omega_r + \frac{\Gamma}{2} \right) t\right)$. Note que, no caso particular $\lambda = 0$, que implica em $\Gamma = 0$ (sistemas não-interagentes), o estado volta a ser separável para todos os instantes de tempo, pois cada partição não interage uma com a outra.

O operador densidade será escrito por

$$\begin{aligned}
\rho(t) &= |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \\
&= \exp\left(-|\mathbf{z}_0|^2\right) \sum_{\substack{n,m \\ n',m'}} \frac{(z_{0x}(t))^n}{\sqrt{n!}} \frac{(z_{0y}(t))^m}{\sqrt{m!}} \frac{(z_{0x}^*(t))^{n'}}{\sqrt{n'!}} \frac{(z_{0y}^*(t))^{m'}}{\sqrt{m'!}} \\
&\quad \times \exp(-i\Gamma(nm - n'm')t) |n, m\rangle \langle n', m'|.
\end{aligned} \tag{6.5}$$

A matriz densidade reduzida ρ_x é calculada traçando-se a matriz densidade do sistema completo em relação à partição y :

$$\rho_x(t) = \text{Tr}_y \rho(t) = \sum_{m''} \langle m'' | \rho(t) | m'' \rangle. \tag{6.6}$$

Como $|m''\rangle$ só atuará nos termos relacionados à partição y (ou seja, na soma da eq. (6.5), apenas em $|m\rangle$ e $|m'\rangle$), teremos expressões do tipo

$$\begin{aligned}
\sum_{m,m',m''} \langle m''|m\rangle \langle m'|m''\rangle f(m)g(m') &= \sum_{\substack{m,m' \\ m''}} f(m)g(m') \delta_{mm'} \delta_{m'm''} \\
&= \sum_{m,m'} f(m)g(m') \delta_{mm'} \\
&= \sum_m f(m)g(m).
\end{aligned} \tag{6.7}$$

Esse resultado então nos leva a

$$\begin{aligned}
\rho_x(t) &= \exp(-|\mathbf{z}_0|^2) \sum_{n,n'} \frac{(z_{0x}(t))^n (z_{0x}(t))^{n'}}{\sqrt{n!n'}} |n\rangle \langle n'| \\
&\times \underbrace{\sum_m \frac{|z_{0y}(t)|^{2m}}{m!} \exp(-i\Gamma(m(n-n'))t)}_{=\exp(|z_{0y}(t)|^2 \exp(-i\Gamma((n-n'))t))}.
\end{aligned} \tag{6.8}$$

Note que $|z_{0r}(t)|^2 = |z_{0r}|^2$. Precisamos agora calcular $\rho_x^2(t)$. Utilizando a última equação obtemos

$$\begin{aligned}
\rho_x^2(t) &= \exp(-2|\mathbf{z}_0|^2) \sum_{\substack{n,n' \\ n'',n'''}} \frac{(z_{0x}(t))^n (z_{0x}(t))^{n'}}{\sqrt{n!n'}} \frac{(z_{0x}^*(t))^{n''} (z_{0x}^*(t))^{n'''}}{\sqrt{n''!n'''!}} \\
&\times |n\rangle \underbrace{\langle n' | n'' \rangle}_{=\delta_{n',n''}} \langle n''' | \exp\left[|z_{0y}|^2 [\exp(-i\Gamma(n-n')t) + \exp(-i\Gamma(n''-n''')t)]\right] \\
&= \exp(-2|\mathbf{z}_0|^2) \sum_{n,n',n''} \frac{(z_{0x}(n,t))^n (z_{0x}(t))^{n'}}{\sqrt{n!n'}} \frac{(z_{0x}^*(n',t))^{n'} (z_{0x}^*(t))^{n''}}{\sqrt{n'!n''!}} \\
&\times |n\rangle \langle n'' | \exp\left[|z_{0y}|^2 [\exp(-i\Gamma(n-n')t) + \exp(-i\Gamma(n'-n'')t)]\right].
\end{aligned} \tag{6.9}$$

Finalmente, a pureza exata se escreve

$$\begin{aligned}
P_t &= \text{Tr}_x \rho_x^2(t) = \sum_l \langle l | \rho_x^2(t) | l \rangle \\
&= \exp(-2|\mathbf{z}_0|^2) \sum_{\substack{n, n' \\ n'', l}} \frac{(z_{0x}(t))^n (z_{0x}(t))^{n'} (z_{0x}^*(t))^{n'} (z_{0x}^*(t))^{n''}}{\sqrt{n!n'!} \sqrt{n'!n''!}} \\
&\quad \times \delta_{l,n} \delta_{l,n''} \exp(|z_{0y}|^2 (\exp(-i\Gamma(n-n')t) + \exp(-i\Gamma(n'-n'')t))) \\
&= \exp(-2|\mathbf{z}_0|^2) \sum_{n', l} \frac{(z_{0x}(t))^l (z_{0x}(t))^{n'} (z_{0x}^*(t))^{n'} (z_{0x}^*(t))^l}{\sqrt{l!n'!} \sqrt{n'!l!}} \\
&\quad \times \exp\left(|z_{0y}|^2 \underbrace{(\exp(-i\Gamma(l-n')t) + \exp(-i\Gamma(n'-l)t))}_{2\cos(\Gamma(n'-l)t)}\right) \\
&= \exp(-2|\mathbf{z}_0|^2) \sum_{n', l} \frac{|z_{0x}(t)|^{2n'} |z_{0x}(t)|^{2l}}{n'!l!} \exp(|z_{0y}|^2 2\cos(\Gamma(n'-l)t)) \\
&= \exp(-2|z_{0x}|^2) \sum_{n, m} \frac{|z_{0x}|^{2(n+m)}}{n!m!} \exp(-2|z_{0y}|^2 (1 - \cos(\Gamma(n-m)t))) \\
&= \exp(-2|z_{0x}|^2) \sum_{n, m} \frac{|z_{0x}|^{2(n+m)}}{n!m!} \exp\left(-2|z_{0y}|^2 \left(2\sin^2\left(\frac{\Gamma(n-m)t}{2}\right)\right)\right),
\end{aligned} \tag{6.10}$$

onde usamos o fato de que $|\mathbf{z}_0|^2 = |z_{0x}|^2 + |z_{0y}|^2$, e também fizemos a mudança de índices $n' \rightarrow n$ e $l \rightarrow m$. Então, chegamos a

$$P_t = \exp(-2|z_{0x}|^2) \sum_{n, m} \frac{|z_{0x}|^{2(n+m)}}{n!m!} \exp\left(-4|z_{0y}|^2 \sin^2\left(\frac{\Gamma(n-m)t}{2}\right)\right). \tag{6.11}$$

É possível observar, para o caso estudado, que a pureza é periódica no tempo: o único termo dependente do tempo é $\sin^2(\Gamma(n-m)t/2)$. Sendo assim, quando este termo retorna ao seu valor inicial, a pureza também o faz. O período de $\sin^2(x)$ é π , de modo que o tempo de recoerência τ_{rec} pode ser definido por

$$\frac{\Gamma\tau_{\text{rec}}}{2} = \pi \implies \tau_{\text{rec}} = \frac{2\pi}{\Gamma} = \frac{2\pi}{\lambda\hbar\omega_x\omega_y}. \tag{6.12}$$

Podemos, então, definir um *tempo adimensional* $\tau = t/\tau_{\text{rec}}$. Neste caso, o intervalo $0 \leq \tau \leq 1$ compreende toda a dinâmica do problema. Escrevendo a pureza em termos do tempo adimensional, obtemos

$$P_\tau = \exp(-2|z_{0x}|^2) \sum_{n, m} \frac{|z_{0x}|^{2(n+m)}}{n!m!} \exp(-4|z_{0y}|^2 \sin^2(\pi\tau(n-m))), \tag{6.13}$$

que é a expressão com a qual pretendemos comparar nossa aproximação semiclássica.

Um detalhe importante da pureza exata é que, se $\tau = k$, sendo k um número inteiro, o valor da pureza vale

$$P_k = 1. \quad (6.14)$$

Fisicamente, isso significa que, em $\tau = 0$, as duas partições são separáveis; os dois sistemas ainda não começaram a interagir. Imediatamente após esse instante inicial, os dois sistemas passam a interagir, e não podemos mais falar de um sistema separadamente do outro: eles estão emaranhados. Passado um intervalo de tempo $\tau = 1$, podemos dizer que os sistemas interagiram de tal forma que eles voltam a ser separáveis! Este ciclo de decoerência e recoerência se repete infinitas vezes. Por isso, restringiremos o valor do tempo para $0 \leq \tau \leq 1$.

6.2 Cálculo das trajetórias para o sistema estudado

Seguindo a nossa prescrição semiclássica apresentada no capítulo anterior, ou mais precisamente, de acordo com a eq. (4.28), a Hamiltoniana (semi)clássica que nos interessa tem a forma

$$\tilde{\mathcal{H}} \equiv \langle \mathbf{v} | \mathcal{H} | \mathbf{u} \rangle = \hbar \Omega_x v_x u_x + \hbar \Omega_y v_y u_y + \hbar \Gamma v_x u_x v_y u_y + \epsilon_0. \quad (6.15)$$

As equações de movimento (4.27) são dadas por

$$\begin{aligned} \dot{u}_x &= -\frac{i}{\hbar} (\hbar \Omega_x u_x + \hbar \Gamma u_x v_y u_y) = -i (\Omega_x + \Gamma v_y u_y) u_x; \\ \dot{u}_y &= -\frac{i}{\hbar} (\hbar \Omega_y u_y + \hbar \Gamma u_y v_x u_x) = -i (\Omega_y + \Gamma v_x u_x) u_y; \\ \dot{v}_x &= +\frac{i}{\hbar} (\hbar \Omega_x v_x + \hbar \Gamma v_x v_y u_y) = +i (\Omega_x + \Gamma v_y u_y) v_x; \\ \dot{v}_y &= +\frac{i}{\hbar} (\hbar \Omega_y v_y + \hbar \Gamma v_y v_x u_x) = +i (\Omega_y + \Gamma v_x u_x) v_y. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Para integrar essas equações, podemos usar o seguinte argumento: vamos dividir \dot{u}_x por u_x (e analogamente para as outras variáveis), e integrar de 0 até um tempo genérico t :

$$\begin{aligned} \int_0^t \frac{\dot{u}_x}{u_x} dt' &= \ln(u_x) \Big|_{t'=0}^t = \ln \left(\frac{u_x(t)}{u_x(0)} \right), \\ \int_0^t \frac{\dot{v}_x}{v_x} dt' &= \ln(v_x) \Big|_{t'=0}^t = \ln \left(\frac{v_x(t)}{v_x(0)} \right). \end{aligned} \quad (6.17)$$

Por outro lado, de acordo com as equações de movimento (6.16),

$$\begin{aligned}\int_0^t \frac{\dot{u}_x}{u_x} dt' &= \int_0^t -i (\Omega_x + \Gamma v_y u_y) dt' = -i \left(\Omega_x t + \int_0^t dt' \Gamma v_y u_y \right) = \ln \left(\frac{u_x(t)}{u'_x} \right), \\ \int_0^t \frac{\dot{v}_x}{v_x} dt' &= \int_0^t +i (\Omega_x + \Gamma v_y u_y) dt' = +i \left(\Omega_x t + \int_0^t dt' \Gamma v_y u_y \right) = \ln \left(\frac{v_x(t)}{v'_x} \right),\end{aligned}\quad (6.18)$$

onde a última igualdade foi tirada de (6.17). Agora, vamos calcular a soma dos logaritmos das duas últimas igualdades:

$$\ln \left(\frac{u_x(t)}{u'_x} \right) + \ln \left(\frac{v_x(t)}{v'_x} \right) = \ln \left(\frac{u_x(t)v_x(t)}{u'_x v'_x} \right) = 0,$$

o que implica que

$$\frac{u_x(t)v_x(t)}{u'_x v'_x} = 1 \quad \implies \quad u_x(t)v_x(t) = u'_x v'_x, \quad (6.19)$$

ou seja, o produto $u_x(t)v_x(t) = \text{constante}$, $\forall t$. Um resultado análogo pode ser encontrado para a partição y . Também podemos ver que a integral que aparece na eq. (6.18) é facilmente integrável, uma vez que $u_y v_y = \text{constante}$:

$$\int_0^t dt' \Gamma v_y u_y = \Gamma v_y u_y \int_0^t dt' = \Gamma v_y u_y t. \quad (6.20)$$

Utilizando esses resultados, fica fácil de integrar as eqs. (6.16), que são do tipo $\dot{u}_x = C u_x$, onde C é uma constante, o que nos dá $u_x(t) = u'_x \exp(Ct)$, com resultados análogos para as outras equações de movimento. Resumindo, em termos das variáveis iniciais u'_x, u'_y, v'_x e v'_y , as trajetórias semiclássicas são dadas por

$$\begin{aligned}u_x(t) &= u'_x \exp \left(-i \left(\Omega_x + \Gamma v'_y u'_y \right) t \right) \equiv u'_x \exp \left(-\lambda'_x t \right); \\ u_y(t) &= u'_y \exp \left(-i \left(\Omega_y + \Gamma v'_x u'_x \right) t \right) \equiv u'_y \exp \left(-\lambda'_y t \right); \\ v_x(t) &= v'_x \exp \left(+i \left(\Omega_x + \Gamma v'_y u'_y \right) t \right) \equiv v'_x \exp \left(+\lambda'_x t \right); \\ v_y(t) &= v'_y \exp \left(+i \left(\Omega_y + \Gamma v'_x u'_x \right) t \right) \equiv v'_y \exp \left(+\lambda'_y t \right).\end{aligned}\quad (6.21)$$

A partir destas equações de movimento, a matriz de monodromia (4.38) associada a uma trajetória pode ser diretamente calculada. Para isso, obtemos as variações $\delta u''_x, \delta u''_y, \delta v''_x$ e $\delta v''_y$, calculadas no instante final, em função de $\delta u'_x, \delta u'_y, \delta v'_x, \delta v'_y$, calculadas no instante inicial, a partir das eqs. (6.21). Tais variações são dadas por

$$\begin{aligned}\delta u''_x &= \exp \left(-\lambda'_x t \right) \left(\delta u'_x - i \Gamma t u'_x v'_y \delta u'_y + 0 - i \Gamma t u'_x u'_y \delta v'_y \right); \\ \delta u''_y &= \exp \left(-\lambda'_y t \right) \left(-i \Gamma t v'_x u'_y \delta u'_x + \delta u'_y - i \Gamma t u'_x u'_y \delta v'_x + 0 \right); \\ \delta v''_x &= \exp \left(+\lambda'_x t \right) \left(0 + i \Gamma t v'_x v'_y \delta u'_y + \delta v'_x + i \Gamma t v'_x u'_y \delta v'_y \right); \\ \delta v''_y &= \exp \left(+\lambda'_y t \right) \left(i \Gamma t v'_x v'_y \delta u'_x + 0 + i \Gamma t u'_x v'_y \delta v'_x + \delta v'_y \right),\end{aligned}\quad (6.22)$$

ou, em forma matricial,

$$\begin{bmatrix} \delta u''_x \\ \delta u''_y \\ \delta v''_x \\ \delta v''_y \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} \delta u'_x \\ \delta u'_y \\ \delta v'_x \\ \delta v'_y \end{bmatrix} = M_2 M_1 \begin{bmatrix} \delta u'_x \\ \delta u'_y \\ \delta v'_x \\ \delta v'_y \end{bmatrix}, \quad (6.23)$$

sendo as matrizes

$$M_2 = \begin{bmatrix} \exp(-\lambda'_x t) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(-\lambda'_y t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(+\lambda'_x t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(+\lambda'_y t) \end{bmatrix} \text{ e} \quad (6.24)$$

$$M_1 = \begin{bmatrix} 1 & -i\Gamma t u'_x v'_y & 0 & -i\Gamma t u'_x v'_y \\ -i\Gamma t v'_x u'_y & 1 & -i\Gamma t u'_x u'_y & 0 \\ 0 & i\Gamma t v'_x v'_y & 1 & i\Gamma t v'_x u'_y \\ i\Gamma t v'_x v'_y & 0 & i\Gamma t u'_x v'_y & 1 \end{bmatrix}.$$

Tendo em mãos as equações para as trajetórias, podemos calcular a ação complexa e o fator \mathcal{G}_ξ , importantes para a aproximação semiclássica utilizada:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', t) &= \xi \int_0^t \left[\frac{i\hbar}{2} (\dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{u}}) - \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \right] dt' - \frac{i\hbar}{2} [\mathbf{u}' \cdot \mathbf{v}' + \mathbf{u}'' \cdot \mathbf{v}''] \\ &= \xi t \hbar \Gamma u'_x v'_x u'_y v'_y - i\hbar (u'_x v'_x + u'_y v'_y); \\ \mathcal{G}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', t) &= \frac{\xi}{2} \int_0^t \left(\frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_x \partial v_x} + \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u_y \partial v_y} \right) dt' \\ &= \frac{\xi t \hbar \Gamma}{2} (u'_x v'_x + u'_y v'_y) + \frac{\xi t \hbar \Gamma}{2} \left(\frac{\Omega_x + \Omega_y}{\Gamma} \right). \end{aligned} \quad (6.25)$$

Lembramos que, no cálculo final, o somatório dos termos $\xi t \hbar \Gamma (\Omega_x + \Omega_y)$ de cada trajetória se anulará, por causa dos sinais contidos em ξ . Então, escolhemos escrever \mathcal{G}_ξ , sem tais termos, nos dando, no final,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', t) &= \xi t \hbar \Gamma u'_x v'_x u'_y v'_y - i\hbar (u'_x v'_x + u'_y v'_y); \\ \mathcal{G}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', t) &= \frac{\xi t \hbar \Gamma}{2} (u'_x v'_x + u'_y v'_y). \end{aligned} \quad (6.26)$$

6.3 Análise das trajetórias

Como visto no decorrer desta dissertação, a versão semiclássica dos propagadores, e, portanto, da pureza, é escrita em termos de trajetórias clássicas. Para este estudo de

caso, quais são essas trajetórias? Precisamos lembrar que precisamos de conjuntos de quatro trajetórias, uma vez que temos quatro propagadores.

Reescrevendo as eqs. (6.21) em termos do tempo adimensional $\tau = t/\tau_{\text{rec}}$ definido anteriormente:

$$\begin{aligned}
u_x(\tau) &= u'_x \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_y u'_y \right) \tau \right) \equiv u'_x \exp(-\lambda_x \tau); \\
u_y(\tau) &= u'_y \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_y}{\Gamma} + v'_x u'_x \right) \tau \right) \equiv u'_y \exp(-\lambda_y \tau); \\
v_x(\tau) &= v'_x \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_y u'_y \right) \tau \right) \equiv v'_x \exp(+\lambda_x \tau); \\
v_y(\tau) &= v'_y \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_y}{\Gamma} + v'_x u'_x \right) \tau \right) \equiv v'_y \exp(+\lambda_y \tau).
\end{aligned} \tag{6.27}$$

Note a ausência de linha em λ_r , que é diferente de λ'_r definido originalmente nas eqs. (6.21), sendo dados por $\lambda_r = \lambda'_r \tau_{\text{rec}}$. Também cometemos um abuso de notação ao definir de maneira ambígua as funções presentes em (6.21) e (6.27). Como serão estas as expressões que utilizaremos em todos os cálculos, não vemos necessidade de alterar a notação.

As trajetórias dadas pelas eqs. (6.27) estão escritas em função dos valores iniciais das variáveis. Mas lembramos que aquelas envolvidas no cálculo semiclássico da pureza devem satisfazer condições de contorno mais complicadas (eqs. (5.20) e (5.21)). Impondo a eq. (5.20), podemos escrever as quatro trajetórias pertencentes a um conjunto contribuinte como

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} u_{x,1}(\tau) \\ u_{y,1}(\tau) \\ v_{x,1}(\tau) \\ v_{y,1}(\tau) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} z_{0x} e^{(-2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{y,1} z_{0y}) \tau)} \\ z_{0y} e^{(-2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{x,1} z_{0x}) \tau)} \\ v'_{x,1} e^{(+2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{y,1} z_{0y}) \tau)} \\ v'_{y,1} e^{(+2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{x,1} z_{0x}) \tau)} \end{bmatrix}; & \begin{bmatrix} u_{x,2}(\tau) \\ u_{y,2}(\tau) \\ v_{x,2}(\tau) \\ v_{y,2}(\tau) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} u'_{x,2} e^{(-2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0y}^* u'_{y,2}) \tau)} \\ u'_{y,2} e^{(-2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{x,2}) \tau)} \\ z_{0x}^* e^{(+2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0y}^* u'_{y,2}) \tau)} \\ z_{0y}^* e^{(+2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{x,2}) \tau)} \end{bmatrix}; \\
\begin{bmatrix} u_{x,3}(\tau) \\ u_{y,3}(\tau) \\ v_{x,3}(\tau) \\ v_{y,3}(\tau) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} z_{0x} e^{(-2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{y,3} z_{0y}) \tau)} \\ z_{0y} e^{(-2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{x,3} z_{0x}) \tau)} \\ v'_{x,3} e^{(+2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{y,3} z_{0y}) \tau)} \\ v'_{y,3} e^{(+2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{x,3} z_{0x}) \tau)} \end{bmatrix}; & \begin{bmatrix} u_{x,4}(\tau) \\ u_{y,4}(\tau) \\ v_{x,4}(\tau) \\ v_{y,4}(\tau) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} u'_{x,4} e^{(-2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0y}^* u'_{y,4}) \tau)} \\ u'_{y,4} e^{(-2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{x,4}) \tau)} \\ z_{0x}^* e^{(+2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0y}^* u'_{y,4}) \tau)} \\ z_{0y}^* e^{(+2\pi i (\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{x,4}) \tau)} \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{6.28}$$

Note que a completa definição do conjunto de quatro trajetórias contribuintes depende ainda da determinação de oito parâmetros, $v'_{x,1}, v'_{y,1}, \dots, u'_{x,4}, u'_{y,4}$, tarefa que será realizada agora. Admitindo que o instante τ das últimas equações se refira ao ponto final das

trajetórias, verificamos que as oito condições de contorno, presentes em (5.21), tornam-se

$$\begin{aligned}
z_{0x} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{y,1} z_{0y} \right) \tau \right) &= u'_{x,4} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{y,4} \right) \tau \right); \\
z_{0y} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{x,1} z_{0x} \right) \tau \right) &= u'_{y,2} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{x,2} \right) \tau \right); \\
z_{0x}^* \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{y,2} \right) \tau \right) &= v'_{x,3} \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{y,3} z_{0y} \right) \tau \right); \\
z_{0y}^* \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{x,2} \right) \tau \right) &= v'_{y,1} \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{x,1} z_{0x} \right) \tau \right); \\
z_{0x} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{y,3} z_{0y} \right) \tau \right) &= u'_{x,2} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{y,2} \right) \tau \right); \\
z_{0y} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{x,3} z_{0x} \right) \tau \right) &= u'_{y,4} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{x,4} \right) \tau \right); \\
z_{0x}^* \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{y,4} \right) \tau \right) &= v'_{x,1} \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{y,1} z_{0y} \right) \tau \right); \\
z_{0y}^* \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + z_{0x}^* u'_{x,4} \right) \tau \right) &= v'_{y,3} \exp \left(+2\pi i \left(\frac{\Omega_x}{\Gamma} + v'_{x,3} z_{0x} \right) \tau \right).
\end{aligned} \tag{6.29}$$

Definindo $a_x = 2\pi |z_{0x}|^2$ e $a_y = 2\pi |z_{0y}|^2$, assim como

$$\begin{aligned}
x_1 &= \frac{v'_{x,1}}{z_{0x}^*}, & x_2 &= \frac{u'_{x,2}}{z_{0x}}, & x_3 &= \frac{v'_{x,3}}{z_{0x}^*}, & x_4 &= \frac{u'_{x,4}}{z_{0x}}, \\
y_1 &= \frac{v'_{y,1}}{z_{0y}^*}, & y_2 &= \frac{u'_{y,2}}{z_{0y}}, & y_3 &= \frac{v'_{y,3}}{z_{0y}^*}, & y_4 &= \frac{u'_{y,4}}{z_{0y}},
\end{aligned} \tag{6.30}$$

obtemos, para (6.29),

$$\begin{aligned}
\exp(-ia_y(y_1 - y_4)\tau) &= x_4; & \exp(-ia_x(x_1 - x_2)\tau) &= y_2; \\
\exp(+ia_y(y_2 - y_3)\tau) &= x_3; & \exp(+ia_x(x_2 - x_1)\tau) &= y_1; \\
\exp(-ia_y(y_3 - y_2)\tau) &= x_2; & \exp(-ia_x(x_3 - x_4)\tau) &= y_4; \\
\exp(+ia_y(y_4 - y_1)\tau) &= x_1; & \exp(+ia_x(x_4 - x_3)\tau) &= y_3.
\end{aligned} \tag{6.31}$$

Uma simples inspeção nestas equações nos mostra que

$$x_1 = x_4, \quad x_3 = x_2, \quad y_3 = y_4, \quad \text{e} \quad y_1 = y_2. \tag{6.32}$$

Reduzimos, portanto, nosso problema a quatro equações:

$$\begin{aligned}
x_2 &= \exp(+ia_y(y_2 - y_4)\tau); & y_2 &= \exp(+ia_x(x_2 - x_4)\tau); \\
x_4 &= \exp(-ia_y(y_2 - y_4)\tau); & y_4 &= \exp(-ia_x(x_2 - x_4)\tau),
\end{aligned} \tag{6.33}$$

de onde podemos ver que $x_2 x_4 = y_2 y_4 = 1$. Isso implica em $x_4 = 1/x_2$ e $y_4 = 1/y_2$, nos levando a

$$x_2 = \exp\left(+ia_y\left(y_2 - \frac{1}{y_2}\right)\tau\right) \quad \text{e} \quad y_2 = \exp\left(+ia_x\left(x_2 - \frac{1}{x_2}\right)\tau\right). \tag{6.34}$$

Substituindo a segunda expressão na primeira, obtemos, finalmente:

$$x_2 = \exp \left[+ia_y \tau \left(\exp \left(+ia_x \left(x_2 - \frac{1}{x_2} \right) \tau \right) - \exp \left(-ia_x \left(x_2 - \frac{1}{x_2} \right) \tau \right) \right) \right]. \quad (6.35)$$

A eq. (6.35), que é transcendental, só pode ser resolvida numericamente, exceto para um caso muito simples: se $x_2 = 1$, a equação é satisfeita para todos os instantes de tempo. Neste caso, pode-se mostrar que $x_i = y_i = 1$, para $i = 1, \dots, 4$, implicando que as quatro trajetórias, associadas a esta solução, são reais: são aquelas que definiam o conjunto trivial. A eq. (6.35) também nos diz *como* obter as quatro trajetórias de um conjunto contribuinte; uma vez obtido x_2 , podemos voltar no passo-a-passo que realizamos aqui, e obter todos os diversos x_i e y_i , e, por consequência, os oito parâmetros outrora indefinidos na eq. (6.28).

6.4 Resolvendo a equação transcendental

Vamos definir uma função $f(x_2)$ da seguinte maneira:

$$f(x_2) = x_2 - \exp \left[+ia_y \tau \left(\exp \left(+ia_x \left(x_2 - \frac{1}{x_2} \right) \tau \right) - \exp \left(-ia_x \left(x_2 - \frac{1}{x_2} \right) \tau \right) \right) \right]. \quad (6.36)$$

Esta função nada mais é do que o lado esquerdo da igualdade de (6.35) subtraído do lado direito. Dessa maneira, ao resolver a eq. (6.35), estamos procurando as raízes de $f(x_2)$, procedimento que podemos realizar amparados em gráficos. Veja, por exemplo, os gráficos da fig. 6.1. As raízes são dadas pelas interseções das linhas pontilhadas e tracejadas, que são, respectivamente, as curvas que satisfazem $\text{Re}(f(x_2)) = 0$ e $\text{Im}(f(x_2)) = 0$.

Um caso especial acontece quando $\tau = 0$. Neste instante de tempo, a função se torna $f(x_2) = x_2 - 1$, como é fácil de demonstrar. Dessa maneira, há apenas *uma* solução, $x_2 = 1$, ilustrado na fig. 6.1(a). Este ponto é especial pois continua satisfazendo a condição de que $f(x_2) = 0$ para todos os instantes de tempo (veja as figs. 6.1(b) e (c)), sendo justamente o ponto que define o conjunto trivial utilizado em [12].

À medida que o tempo passa e o sistema interage, mais raízes de (6.36) surgem, como ilustrado na fig. 6.1(b). Entretanto, há alguns importantes detalhes a se considerar. Para tempos ainda maiores, notamos que a quantidade de raízes começa a ficar muito grande, como mostrado na fig. 6.1(d). Dessa maneira, teremos, em princípio, uma quantidade inumerável de pontos para considerar. Em nosso auxílio, podemos nos utilizar do seguinte argumento: no limite *estritamente* clássico, as únicas trajetórias fisicamente relevantes são

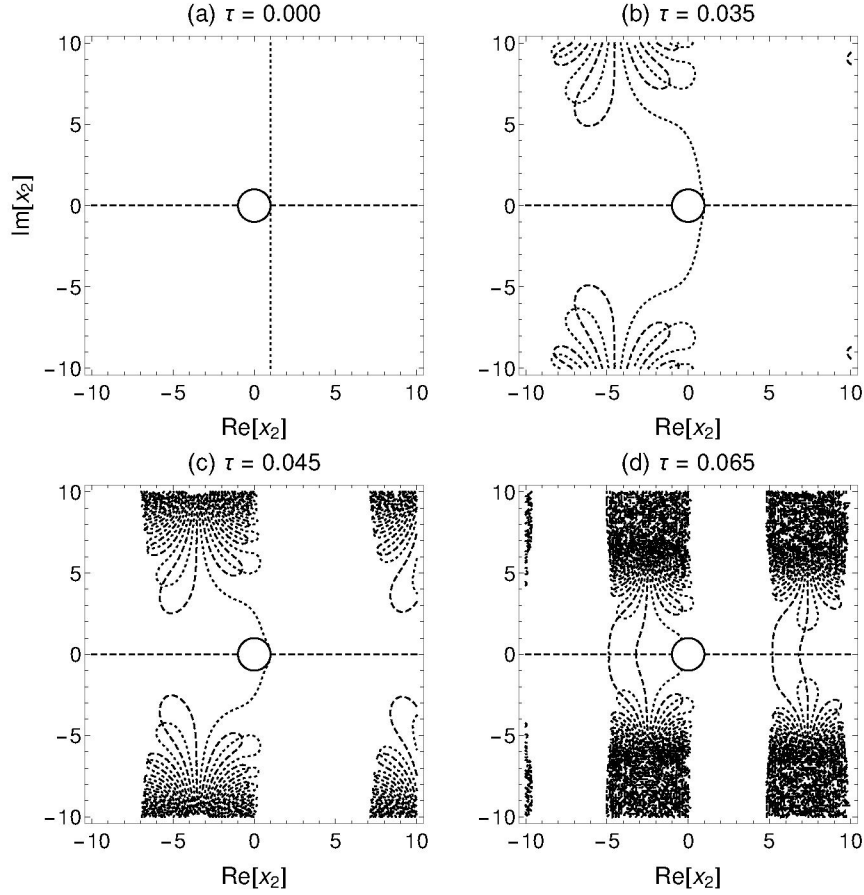


Figura 6.1: Ilustração das raízes de $f(x_2)$. A linha pontilhada representa $\text{Re}(f(x_2)) = 0$, enquanto a linha tracejada representa $\text{Im}(f(x_2)) = 0$. As raízes, então, são encontradas nos cruzamentos das linhas. Os parâmetros numéricos são: $E_{0r} = \omega_{0r} = \lambda = 1$, $\hbar = \pi/5$ e $z_{0r} = \sqrt{E_{0r}/(\hbar\omega_r)}$. Note o surgimento de um número grande de raízes, à medida que avançamos no tempo.

as reais. Afinal, as complexas podem ser vistas, de fato, como uma ferramenta matemática que auxilia na descrição de fenômenos quânticos. Como pretendemos trabalhar em regime semiclássico (quase clássico!), é de se esperar que contribuições relevantes se originem da vizinhança da trajetória real. Assim, os pontos que nos interessam são aqueles mais próximos do ponto trivial $x_2 = 1$.

6.4.1 Método de Newton-Raphson

Para resolver a eq. (6.35) numericamente, primeiramente localizamos graficamente as soluções que julgamos importantes, conforme mostramos na seção anterior. Em seguida, como este procedimento naturalmente envolve imprecisões, utilizamos o método

de Newton-Raphson multidimensional para aprimorar os resultados. O método consiste em resolver, iterativamente, a equação [27]

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{J}_f^{-1}(\mathbf{x}_n) \mathbf{f}(\mathbf{x}_n), \quad (6.37)$$

onde

$$\mathbf{J}_f(\mathbf{x}_n) = \begin{bmatrix} \partial_{e_1} f_1(\mathbf{x}_n) & \partial_{e_2} f_1(\mathbf{x}_n) & \dots \\ \partial_{e_1} f_2(\mathbf{x}_n) & \partial_{e_2} f_2(\mathbf{x}_n) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (6.38)$$

é a matriz Jacobiana, \mathbf{x}_n é o vetor das variáveis no passo n e $f_i(e_1, e_2, \dots)$ são as funções cujas raízes queremos encontrar, com determinada precisão σ . Quando $|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n| < \sigma$, dizemos que o valor de \mathbf{x}_n é a raiz que procurávamos. Para o caso estudado,

$$\mathbf{x}_n = \begin{bmatrix} \text{Re}(x_2)_n \\ \text{Im}(x_2)_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_n \\ y_n \end{bmatrix}, \quad (6.39)$$

e as funções f_i serão definidas a partir da eq. (6.36):

$$f_1(x, y) = \text{Re}(f(x_2)) \quad \text{e} \quad f_2(x, y) = \text{Im}(f(x_2)). \quad (6.40)$$

Dessa maneira, podemos escrever (6.40) como

$$\begin{cases} f_1 = x - \exp(J) \cos(L) \\ f_2 = y - \exp(J) \sin(L) \end{cases}, \quad \text{com} \quad \begin{cases} J = 2A_y \sin(A_x R) \cosh(A_x I) \\ L = 2A_y \cos(A_x R) \sinh(A_x I) \\ R = -x + \frac{x}{x^2 + y^2} \\ I = -y - \frac{y}{x^2 + y^2} \end{cases}, \quad (6.41)$$

e $A_r = 2\pi |z_{0r}|^2 \tau$. As derivadas da matriz Jacobiana são dadas por

$$\begin{aligned} \partial_x f_1 &= 1 - (\partial_x J) \exp(J) \cos(L) + (\partial_x L) \exp(J) \sin(L); \\ \partial_y f_1 &= 0 - (\partial_y J) \exp(J) \cos(L) + (\partial_y L) \exp(J) \sin(L); \\ \partial_x f_2 &= 0 - (\partial_x J) \exp(J) \sin(L) + (\partial_x L) \exp(J) \cos(L); \\ \partial_y f_2 &= 1 - (\partial_y J) \exp(J) \sin(L) + (\partial_y L) \exp(J) \cos(L), \end{aligned} \quad (6.42)$$

com as derivadas de J e L dadas por

$$\begin{aligned} \partial_x J &= 2A_y A_x ((\partial_x R) \cos(A_x R) \cosh(A_x I) + (\partial_x I) \sin(A_x R) \sinh(A_x I)); \\ \partial_y J &= 2A_y A_x ((\partial_y R) \cos(A_x R) \cosh(A_x I) + (\partial_y I) \sin(A_x R) \sinh(A_x I)); \\ \partial_x L &= 2A_y A_x (- (\partial_x R) \sin(A_x R) \sinh(A_x I) + (\partial_x I) \cos(A_x R) \cosh(A_x I)); \\ \partial_y L &= 2A_y A_x (- (\partial_y R) \sin(A_x R) \sinh(A_x I) + (\partial_y I) \cos(A_x R) \cosh(A_x I)), \end{aligned} \quad (6.43)$$

sendo

$$\begin{aligned}
\partial_x R &= -1 + \frac{1}{x^2 + y^2} - \frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2}; \\
\partial_y R &= -\frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2}; \\
\partial_x I &= +\frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2}; \\
\partial_y I &= -1 - \frac{1}{x^2 + y^2} + \frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2}.
\end{aligned} \tag{6.44}$$

Definidas todas estas funções, e fornecendo uma solução aproximada gráfica $\mathbf{x}_{n=0}$, o método se mostrou eficiente para aprimorar o resultado.

Como uma ilustração da utilidade do método, podemos ver, na fig. 6.2, o comportamento de duas soluções ao variarmos o tempo τ . Com o passar do tempo, vemos o caminho que x e y , partes real e imaginária de x_2 , respectivamente, percorrem. A maneira com que obtivemos estes pontos é simples: uma vez obtido x_2 para um dado τ , fazemos a mudança $\tau \rightarrow \tau + \epsilon$, onde ϵ é um intervalo de tempo muito pequeno, utilizando como nova tentativa o valor obtido para o tempo anterior. Poderíamos fazer um gráfico semelhante, *a priori*, para *todos* os pontos que aparecem nos gráficos das figs. 6.1(b)-(d).

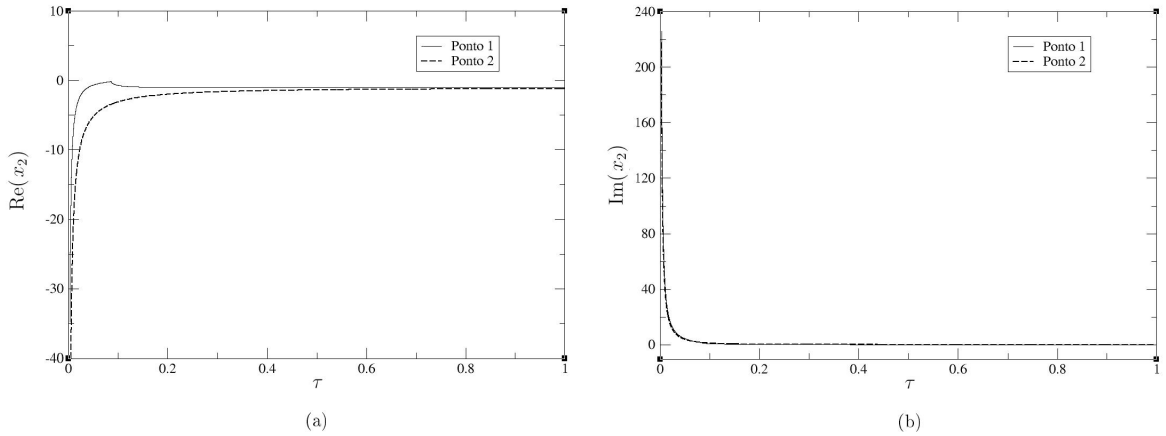


Figura 6.2: (a) Parte real das trajetórias realizada por dois pontos x_2 , obtidos através do método de Newton-Raphson. (b) Parte imaginária das trajetórias realizadas pelos mesmos pontos. Ao passar do tempo, ambas as trajetórias ficam muito próximas. Estes são os pontos mais próximos da origem (no semiplano $\text{Im}(x_2) > 0$) que aparecem na fig. 6.1 (b).

Para finalizar a descrição do método de Newton-Raphson, podemos observar outro ponto importante. Ao obter \bar{x}_2 , onde a barra indica que $f(\bar{x}_2) = 0$, automaticamente obtemos mais três outras raízes, em geral: seu inverso, $(\bar{x}_2)^{-1}$, seu complexo conjugado $\bar{x}_2^* = x - iy$, e também $(\bar{x}_2^*)^{-1}$. É fácil de demonstrar isso a partir da própria definição de

$f(x_2)$, bastando substituir x_2 por um dos outros pontos em questão. Isso é importante, numericamente, para acelerar a obtenção de raízes, uma vez que, para alta precisão, a implementação do método pode levar alguns minutos para calcular cada ponto diferente. Devemos tomar cuidado ao considerar pontos onde $|x_2| = 1$ e/ou $\text{Im}(x_2) = 0$ (o que inclui a trajetória trivial, pontos no círculo unitário, e pontos na reta real) ao calcular os outros três pontos, pois, nestes casos, esta regra falha. Se isso acontecer, iremos adicionar suas contribuições diversas vezes, nos levando a erros.

Assim, estas últimas seções indicam uma estratégia para incluir trajetórias na fórmula da pureza semiclássica.

6.5 Pureza semiclássica

Como visto anteriormente, podemos escrever as trajetórias em termos de x_i e y_i , com $i = 1, \dots, 4$. Mais especificamente, utilizando o argumento que nos leva à eq. (6.33), podemos trabalhar apenas com x_2, x_4, y_2 e y_4 para calcular as funções $\mathcal{S}^{(i)}$, $\mathcal{G}^{(i)}$ e $\Lambda^{(i)}$. Dessa forma, podemos avançar analiticamente no cálculo da pureza semiclássica.

Primeiro, vamos calcular as funções descritas acima em termos de $u_{r,i}$ e $v_{r,i}$, para só depois substituímos as novas variáveis. Utilizando o tempo adimensional $\tau = t/\tau_{\text{rec}}$ na eq. (6.26), a ação complexa e a função \mathcal{G} são dadas por

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', \tau) &= \xi 2\pi\tau\hbar \left(u'_x v'_x u'_y v'_y \right) - i\hbar \left(u'_x v'_x + u'_y v'_y \right); \\ \mathcal{G}_\xi(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', \tau) &= \xi \pi\tau\hbar \left(u'_x v'_x + u'_y v'_y \right),\end{aligned}$$

para cada conjunto de trajetórias. Ao somarmos todos os termos, obtemos

$$\begin{aligned}\sum_i \left(\mathcal{S}^{(i)} + \mathcal{G}^{(i)} \right) &= + 2\pi\tau\hbar \left(u'_{x,1} u'_{y,1} v'_{x,1} v'_{y,1} + \frac{1}{2} \left(u'_{x,1} v'_{x,1} + u'_{y,1} v'_{y,1} \right) \right) \\ &\quad - 2\pi\tau\hbar \left(u'_{x,2} u'_{y,2} v'_{x,2} v'_{y,2} + \frac{1}{2} \left(u'_{x,2} v'_{x,2} + u'_{y,2} v'_{y,2} \right) \right) \\ &\quad + 2\pi\tau\hbar \left(u'_{x,3} u'_{y,3} v'_{x,3} v'_{y,3} + \frac{1}{2} \left(u'_{x,3} v'_{x,3} + u'_{y,3} v'_{y,3} \right) \right) \\ &\quad - 2\pi\tau\hbar \left(u'_{x,4} u'_{y,4} v'_{x,4} v'_{y,4} + \frac{1}{2} \left(u'_{x,4} v'_{x,4} + u'_{y,4} v'_{y,4} \right) \right) \\ &\quad - i\hbar \left(u'_{x,1} v'_{x,1} + u'_{x,2} v'_{x,2} + u'_{x,3} v'_{x,3} + u'_{x,4} v'_{x,4} \right) \\ &\quad - i\hbar \left(u'_{y,1} v'_{y,1} + u'_{y,2} v'_{y,2} + u'_{y,3} v'_{y,3} + u'_{y,4} v'_{y,4} \right).\end{aligned}$$

É possível escrever

$$\left(u'_{x,i}u'_{y,i}v'_{x,i}v'_{y,i} + \frac{1}{2}\left(u'_{x,i}v'_{x,i} + u'_{y,i}v'_{y,i}\right)\right) = \frac{1}{2}\left(u'_{x,i}v'_{x,i}\left(1 + u'_{y,i}v'_{y,i}\right) + u'_{y,i}v'_{y,i}\left(1 + u'_{x,i}v'_{x,i}\right)\right),$$

nos dando

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \sum_i \left(\mathcal{S}^{(i)} + \mathcal{G}^{(i)}\right) = & + i\pi\tau \left(u'_{x,1}v'_{x,1}\left(1 + u'_{y,1}v'_{y,1}\right) + u'_{y,1}v'_{y,1}\left(1 + u'_{x,1}v'_{x,1}\right)\right) \\ & - i\pi\tau \left(u'_{x,2}v'_{x,2}\left(1 + u'_{y,2}v'_{y,2}\right) + u'_{y,2}v'_{y,2}\left(1 + u'_{x,2}v'_{x,2}\right)\right) \\ & + i\pi\tau \left(u'_{x,3}v'_{x,3}\left(1 + u'_{y,3}v'_{y,3}\right) + u'_{y,3}v'_{y,3}\left(1 + u'_{x,3}v'_{x,3}\right)\right) \\ & - i\pi\tau \left(u'_{x,4}v'_{x,4}\left(1 + u'_{y,4}v'_{y,4}\right) + u'_{y,4}v'_{y,4}\left(1 + u'_{x,4}v'_{x,4}\right)\right) \\ & + u'_{x,1}v'_{x,1} + u'_{x,2}v'_{x,2} + u'_{x,3}v'_{x,3} + u'_{x,4}v'_{x,4} \\ & + u'_{y,1}v'_{y,1} + u'_{y,2}v'_{y,2} + u'_{y,3}v'_{y,3} + u'_{y,4}v'_{y,4}. \end{aligned} \quad (6.45)$$

Utilizar as definições (6.30), assim como as eqs. (6.32), nos permite escrever a somatória como

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \sum_i \left(\mathcal{S}^{(i)} + \mathcal{G}^{(i)}\right) = & + 2\pi i\tau |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2 (x_2 - x_4)(y_4 - y_2) \\ & + 2|z_{0x}|^2 (x_2 + x_4) + 2|z_{0y}|^2 (y_2 + y_4). \end{aligned} \quad (6.46)$$

Do argumento da exponencial dos propagadores, que aparece na eq. (4.48), falta apenas o cálculo de $\Lambda^{(i)}$, que já foi feito anteriormente em (5.23). Usando as definições de x_i e y_i :

$$\begin{aligned} \Lambda^{(1)} &= -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + u''_{x,4}v''_{x,1} + u''_{y,2}v''_{y,1}\right) = -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + |z_{0x}|^2 x_1 + |z_{0y}|^2 y_1\right); \\ \Lambda^{(2)} &= -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + u''_{x,2}v''_{x,3} + u''_{y,2}v''_{y,1}\right) = -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + |z_{0x}|^2 x_2 + |z_{0y}|^2 y_2\right); \\ \Lambda^{(3)} &= -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + u''_{x,2}v''_{x,3} + u''_{y,4}v''_{y,3}\right) = -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + |z_{0x}|^2 x_3 + |z_{0y}|^2 y_3\right); \\ \Lambda^{(4)} &= -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + u''_{x,4}v''_{x,1} + u''_{y,4}v''_{y,3}\right) = -\frac{1}{2} \left(|\mathbf{z}_0|^2 + |z_{0x}|^2 x_4 + |z_{0y}|^2 y_4\right). \end{aligned} \quad (6.47)$$

Definindo $\Lambda_{\text{tot}} = \Lambda^{(1)} + \Lambda^{(2)} + \Lambda^{(3)} + \Lambda^{(4)}$, teremos

$$\begin{aligned} \Lambda_{\text{tot}} &= -\frac{1}{2} \left(4|\mathbf{z}_0|^2 + 2|z_{0x}|^2 (x_2 + x_4) + 2|z_{0y}|^2 (y_2 + y_4)\right) \\ &= -2|\mathbf{z}_0|^2 - |z_{0x}|^2 (x_2 + x_4) - |z_{0y}|^2 (y_2 + y_4), \end{aligned} \quad (6.48)$$

o que, finalmente, nos dá

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \sum_i \left(\mathcal{S}^{(i)} + \mathcal{G}^{(i)}\right) + \Lambda_{\text{tot}} = & + 2\pi i\tau |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2 (x_2 - x_4)(y_4 - y_2) \\ & + 2|z_{0x}|^2 (x_2 + x_4) + 2|z_{0y}|^2 (y_2 + y_4) \\ & - 2|\mathbf{z}_0|^2 - |z_{0x}|^2 (x_2 + x_4) - |z_{0y}|^2 (y_2 + y_4) \\ = & + 2\pi i\tau |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2 (x_2 - x_4)(y_4 - y_2) \\ & + |z_{0x}|^2 (x_2 + x_4 - 2) + |z_{0y}|^2 (y_2 + y_4 - 2). \end{aligned} \quad (6.49)$$

Para finalizar o cálculo da pureza semiclássica, falta calcular a função \mathcal{Y} , dada em (5.31), que pode ser obtida ao utilizar a expressão da matriz de monodromia (6.24), escrita em termos de τ , e das matrizes auxiliares, definidas em (5.32), como mostrado anteriormente. Com isso, obtemos todos os itens necessários.

6.5.1 Trajetórias reais

Como uma primeira aproximação, vamos supor que apenas um conjunto de trajetórias contribua para a pureza total, a *solução trivial* descrita anteriormente, $x_2 = 1 \forall \tau$. Com essa condição, $x_i = y_i = 1$ para qualquer i , implicando que *todas* as trajetórias do conjunto são iguais ($u_{x,1}(\tau) = u_{x,2}(\tau) = u_{x,3}(\tau) = u_{x,4}(\tau)$, e assim por diante). Essa condição também nos diz que as trajetórias voltam a se relacionar como $u_{x,i} = v_{x,i}^*$, $u_{y,i} = v_{y,i}^*$. Portanto, ao utilizar a solução trivial apenas, não utilizamos a extensão do espaço de fase discutida anteriormente. Enfatizamos que este não é um resultado original, já que é o mesmo obtido por [12], descrito aqui na eq. (5.17). Porém, a aplicação da aproximação semiclássica é diferente, uma vez que aqui, partimos da fórmula semiclássica (5.30), que leva em conta trajetórias complexas, mas aplicando ao caso particular da trajetória real. Nesse caso, as condições iniciais são dadas por

$$\begin{bmatrix} u'_x \\ u'_y \\ v'_x \\ v'_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_{0x} \\ z_{0y} \\ z_{0x}^* \\ z_{0y}^* \end{bmatrix}, \quad (6.50)$$

para todas as trajetórias.

Ao calcular o expoente da pureza, dado pela eq. (6.49), percebemos que este é nulo para a solução trivial. O único termo restante para calcular é a raiz quadrada que aparece no denominador da eq. (5.30), $\sqrt{\mathcal{Y}}$. Apenas relembrando aqui,

$$\begin{aligned} \mathcal{Y} &= \det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^{(2)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^{(4)} \det \mathbf{Q} \\ &= + \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^{(2)} - \det \mathbf{B}^{(1)} \det \mathbf{A}^{(2)} \right) \times \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^{(4)} - \det \mathbf{B}^{(3)} \det \mathbf{A}^{(4)} \right) \\ &\quad + \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{u}}^{(2)} - \det \mathbf{D}^{(1)} \det \mathbf{C}^{(2)} \right) \times \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{u}}^{(4)} - \det \mathbf{D}^{(3)} \det \mathbf{C}^{(4)} \right) \\ &\quad - \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(1)} \det \mathbf{C}^{(2)} - \det \mathbf{B}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{u}}^{(2)} \right) \times \left(\det \mathbf{D}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^{(4)} - \det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{(3)} \det \mathbf{A}^{(4)} \right) \\ &\quad - \left(\det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{v}}^{(1)} \det \mathbf{A}^{(2)} - \det \mathbf{D}^{(1)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^{(2)} \right) \times \left(\det \mathbf{B}^{(3)} \det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{u}}^{(4)} - \det \mathbf{M}_{\mathbf{v}\mathbf{v}}^{(3)} \det \mathbf{C}^{(4)} \right) \\ &\quad - \det \mathbf{D}^{(1)} \det \mathbf{C}'^{(2)} \det \mathbf{D}'^{(3)} \det \mathbf{C}''^{(4)} - \det \mathbf{B}'^{(1)} \det \mathbf{A}''^{(2)} \det \mathbf{B}''^{(3)} \det \mathbf{A}'''^{(4)}, \end{aligned}$$

com as matrizes auxiliares definidas como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{D} \\ \mathbf{C} & \mathbf{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{M}} \quad \text{e} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{A}' & \mathbf{D}' \\ \mathbf{C}' & \mathbf{B}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{M}}.$$

Calculando os determinantes necessários, em termos das trajetórias u_r e v_r ,

$$\begin{aligned} \det \mathbf{M}_{\mathbf{uu}} &= + \left(1 - a^2 u'_x u'_y v'_x v'_y\right) \exp \left(-(\lambda_x + \lambda_y) \tau\right); \\ \det \mathbf{M}_{\mathbf{uv}} &= -a^2 u'^2_x u'^2_y \exp \left(-(\lambda_x + \lambda_y) \tau\right); \\ \det \mathbf{M}_{\mathbf{vu}} &= -a^2 v'^2_x v'^2_y \exp \left(+(\lambda_x + \lambda_y) \tau\right); \\ \det \mathbf{M}_{\mathbf{vv}} &= + \left(1 - a^2 u'_x u'_y v'_x v'_y\right) \exp \left(+(\lambda_x + \lambda_y) \tau\right), \end{aligned} \quad (6.51)$$

para os determinantes dos blocos da matriz de monodromia, e também

$$\begin{aligned} \det \mathbf{A} &= +a^2 u'_x v'_x v'^2_y \exp \left(-(\lambda_x - \lambda_y) \tau\right), & \det \mathbf{A}' &= +a v'_x v'_y; \\ \det \mathbf{B} &= +a^2 u'_x v'_x u'^2_y \exp \left(+(\lambda_x - \lambda_y) \tau\right), & \det \mathbf{B}' &= -a u'_x u'_y; \\ \det \mathbf{C} &= +a^2 v'^2_x u'_y v'_y \exp \left(+(\lambda_x - \lambda_y) \tau\right), & \det \mathbf{C}' &= -a v'_x v'_y; \\ \det \mathbf{D} &= +a^2 u'^2_x u'_y v'_y \exp \left(-(\lambda_x - \lambda_y) \tau\right), & \det \mathbf{D}' &= +a u'_x u'_y, \end{aligned} \quad (6.52)$$

para as matrizes auxiliares, com $a \equiv 2\pi i\tau$. Como, para a solução trivial, as quatro trajetórias são iguais, seus respectivos determinantes são todos iguais. Substituindo na expressão para \mathcal{Y} , dada pela eq. (5.31),

$$\mathcal{Y}^{\text{triv.}} = \left(\left(1 - a^2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2\right)^2 - \left(a^2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2\right)^2 \right)^2 - 4 \left(a^2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2\right)^2. \quad (6.53)$$

Após obtermos $\mathcal{Y}^{\text{triv.}}$, podemos gerar um gráfico da pureza semiclássica e da pureza quântica exata, contra o tempo, com τ variando de 0 a 1, obtendo assim a fig. 6.3. Este é o mesmo resultado obtido em [12], reproduzido aqui na eq. (5.17).

Notamos que, para tempo curto, a pureza semiclássica obtida utilizando (6.53) é muito próxima do resultado exato. Podemos demonstrar a validade desse resultado expandindo as expressões da pureza semiclássica e da pureza quântica exata ao considerar τ pequeno.

Para a pureza semiclássica,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\tau^{\text{triv.}} &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Y}}} = \frac{1}{\sqrt{\left((1-D)^2 - D^2\right)^2 - 4D^2}} \\ &\simeq \frac{1}{(1-2D-D^2)^2 - 4D^2} \simeq \frac{1}{1-4D-6D^2} \\ &\simeq 1 + 2D + 3D^2 \simeq 1 + 2D \\ \Rightarrow \mathcal{P}_\tau^{\text{triv.}} &\simeq 1 - 8\pi^2 \tau^2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2, \end{aligned} \quad (6.54)$$

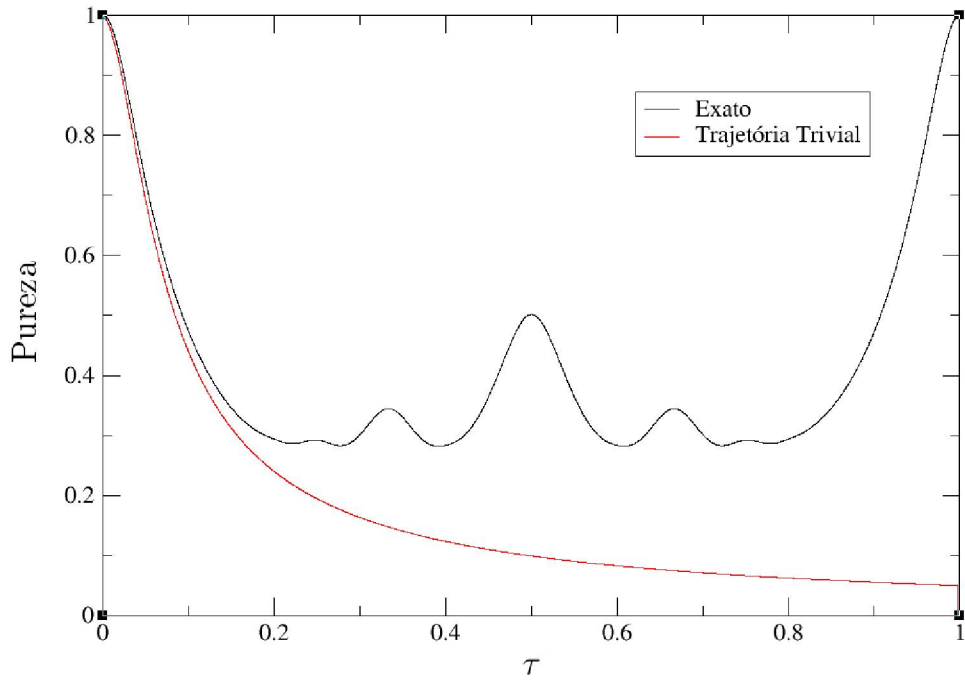


Figura 6.3: Gráfico da pureza exata e da pureza semiclássica utilizando apenas a trajetória trivial. Aqui, utilizamos $|z_{0r}|^2 = E_{0r}/(\hbar\omega_r)$, $E_{0r} = \omega_r = \lambda = 1$, e $\hbar = 0.2\pi$.

com $D = a^2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2$, onde usamos $(1+x)^n \simeq 1 + nx$ para $|x| \ll 1$ e $|nx| \ll 1$, assim como descartamos o termo de ordem D^2 , pois $D^2 \ll D$ no regime em questão. Para a pureza quântica exata, utilizamos a eq. (52) da ref. [12], dada por

$$\begin{aligned}
 P_T^{\text{ref}} &= 1 - 2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2 \Gamma^2 T^2 \\
 &= 1 - 2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2 \underbrace{\frac{\Gamma^2}{(2\pi)^2}}_{=\frac{1}{\tau_{\text{rec}}^2}} T^2 (2\pi)^2 \\
 &= 1 - 8\pi^2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2 \frac{T^2}{\tau_{\text{rec}}^2} \\
 &= 1 - 8\pi^2 |z_{0x}|^2 |z_{0y}|^2 \tau^2,
 \end{aligned} \tag{6.55}$$

mostrando assim que as aproximações são idênticas, a tempo curto. Na fig. 6.4, podemos ver como ambas diferem ao decorrer do tempo, ao mostrar seu erro relativo.

6.5.2 Trajetórias complexas

Como visto anteriormente nas figs. 6.1, imediatamente após $\tau = 0$, novas raízes de (6.36) começam a surgir, sendo pontos potencialmente importantes para o cálculo da pureza

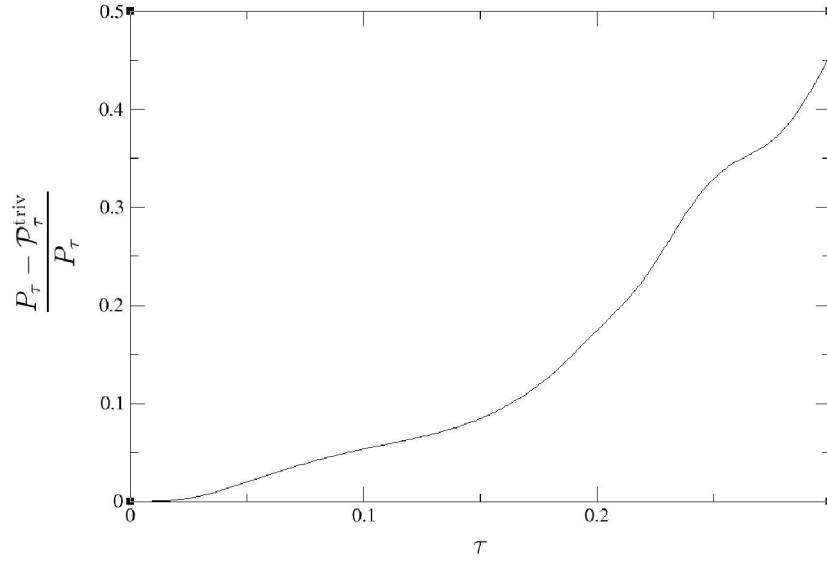


Figura 6.4: Análise da validade da expressão $\mathcal{P}_\tau^{\text{triv}} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Y}^{\text{triv}}}}$, a tempo curto. Comparamos o erro relativo da pureza semiclássica com o seu resultado quântico equivalente. Podemos ver que, a tempo curto, a diferença é extremamente pequena, aumentando ao passar do tempo.

semiclássica. Porém, como dito na subseção acima, voltaremos nossa atenção apenas aos pontos próximos de $x_2 = 1$, pois estes, a princípio, dariam as contribuições mais significativas.

Assim sendo, obteremos as tentativas iniciais para resolver (6.36) do conjunto de pontos mais próximos do resultado trivial, mostrado na fig. 6.1(b), para $\tau = 0.035$. Este será nosso tempo inicial de busca, pois, como veremos mais tarde, para tempos muito menores, soluções de (6.36) estão muito distantes de $x_2 = 1$, ponto que se refere ao conjunto trivial de trajetórias. Veremos, a seguir, que a inclusão inadvertida de tais contribuições produz indesejadas oscilações em \mathcal{P}_τ , que acreditamos serem devidas a erros numéricos.

É importante lembrar que x_2^* também é uma solução de (6.36). Dessa maneira, focamos apenas na região do gráfico onde $y > 0$, uma vez que fazer a mudança $y \rightarrow -y$ nos fornece a solução para o complexo conjugado de x_2 . Feito isso, voltamos nas eqs. (6.32)-(6.34), obtendo os vários x_i e y_i , o que nos permitem obter os diversos u'_r e v'_r , como mostra a eq. (6.30). Podemos, então, calcular a soma de \mathcal{S} , \mathcal{G} e Λ_{tot} , dada pela eq. (6.49), assim como \mathcal{Y} , dado pela eq. (5.31). Novas contribuições para a pureza semiclássica são então obtidas, e adicionadas àquela da solução trivial, dada por $\mathcal{P}_\tau^{\text{triv}} = 1/\sqrt{\mathcal{Y}^{\text{triv}}}$.

Após a aplicação de todo o formalismo discutido nesta dissertação, obtivemos, para o caso específico do Hamiltoniano (6.1), a fig. 6.5. Utilizamos os parâmetros $|z_{0r}|^2 =$

$E_{0r}/(\hbar\omega_r)$, $E_{0r} = \omega_r = \lambda = 1$, e $\hbar = 0.2\pi$, com 41 pontos considerados, sendo estes o conjunto trivial e 20 pontos obtidos da fig. 6.1, com seus respectivos complexos conjugados.

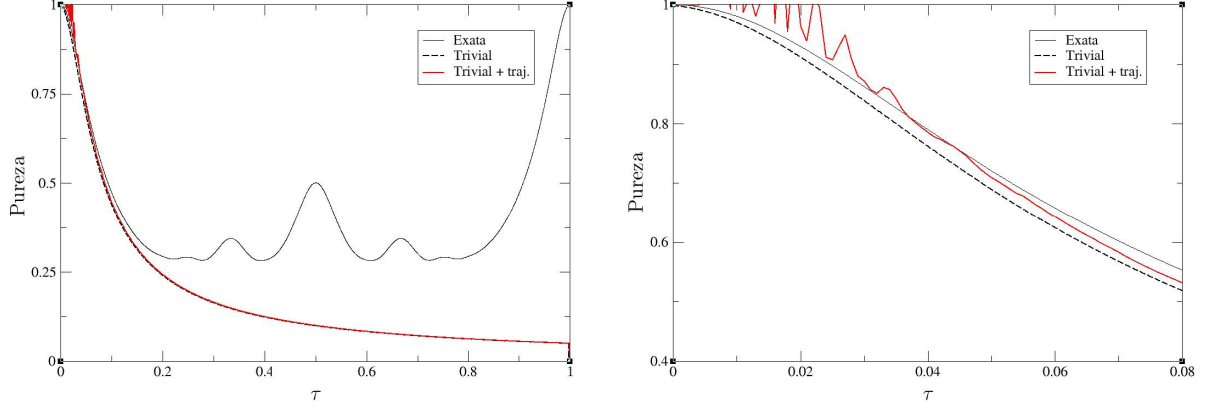


Figura 6.5: (a) Pureza exata, pureza trivial, e pureza trivial adicionada de mais contribuições. A curva exata, obtida através da eq. (6.13), mostra que, ao se passar um intervalo de tempo igual ao tempo de recoerência τ_{rec} , ilustrado aqui como $\tau = 1$, a pureza retorna ao seu valor inicial. O resultado obtido para a trajetória trivial, com as correções obtidas até o momento, não consegue reproduzir as oscilações do resultado exato. (b) Ampliação da pureza a tempos curtos. Parâmetros: $|z_{0r}|^2 = E_{0r}/(\hbar\omega_r)$, $E_{0r} = \omega_r = \lambda = 1$, e $\hbar = 0.2\pi$.

Tais resultados nos deixaram intrigados. Como podemos ver, a curva com linha vermelha, que é justamente a pureza com mais trajetórias adicionadas, é praticamente igual ao gráfico de $\mathcal{P}_{\tau}^{\text{triv}}$, dado pela linha tracejada. Descartamos erro do método de Newton-Raphson pois a partir da identificação das soluções para x_2 em um instante inicial ($\tau = 0.035$), não houve dificuldades em encontrá-las para valores de τ sucessivamente maiores, até o limite $\tau = 1$. Ainda assim, não conseguimos um resultado significativamente mais próximo ao resultado quântico exato. Porém, vemos na fig. 6.5(b), para tempos pequenos, ainda há uma melhora nos resultados, quando introduzimos mais pontos para o cálculo da pureza. A curva se aproxima levemente (com algumas oscilações para tempos curtos, que consideramos espúrias) do resultado exato, para um tempo até aproximadamente $\tau = 0.04$, o que já pode ser visto como uma leve melhora com relação aos resultados obtidos apenas com o conjunto trivial. Isto nos motivou a continuar a busca por melhores conjuntos de trajetórias.

6.5.3 Análise no círculo unitário

Ao olhar para a fig. 6.1, para tempos pequenos, não observamos, além do resultado trivial, soluções próximas à origem ou do próprio resultado trivial. Ao avançar mais no tempo, continuamos vendo as mesmas soluções já vistas, mas mais próximas. Como discutido anteriormente, se x_2 é solução de $f(x_2) = 0$, x_2^{-1} também o é. Então, em algum instante de tempo, pontos próximos da origem devem aparecer; como observado nos gráficos, imediatamente após $\tau = 0$, soluções surgem do infinito. Portanto, seus inversos estão *muito* próximos à origem, de maneira que estes não conseguem ser distinguidos.

Para fazer uma análise melhor, podemos ampliar o gráfico apenas perto da origem e da trajetória trivial. Mais especificamente, estamos interessados nas soluções que moram no círculo unitário ($|x_2| \leq 1$). Na fig. 6.6, podemos ver como as raízes se comportam no decorrer do tempo.

Note que as estruturas que aparecem na fig. 6.1 se repetem próximo da origem, distorcidas, na fig. 6.6. Estas são justamente os inversos das raízes mais distantes. Considerando apenas três pontos (e seus complexos conjugados) que estão no círculo unitário (ou seja, $|x_2| = 1$) e mais próximos de $x_2 = 1$, assim como a trajetória trivial (que também mora no círculo unitário), obtemos os gráficos da fig. 6.7, que apresenta sensível melhoria. A contribuição destas raízes é muito maior do que a dos pontos utilizados para obter a fig. 6.5. Dessa maneira, acreditamos que, para obter um resultado significativo, a escolha de quais pontos considerar é de extrema importância. Considerando esta hipótese, estendemos a busca de raízes para estruturas logo à direita do círculo unitário (as três mais próximas dele), como mostrado na fig. 6.1. Considerando apenas 3 pontos em cada estrutura (e seus complexos conjugados e inversos), assim como o conjunto trivial e as trajetórias do círculo unitário, obtemos a fig. 6.8. Note que descartamos o uso dos 20 outros pontos utilizados para obter a fig. 6.5. Podemos ver que nosso método é muito robusto, conseguindo, com poucas contribuições, reproduzir com bastante fidelidade o resultado quântico exato, incluindo as oscilações causadas pela interferência dos subsistemas.

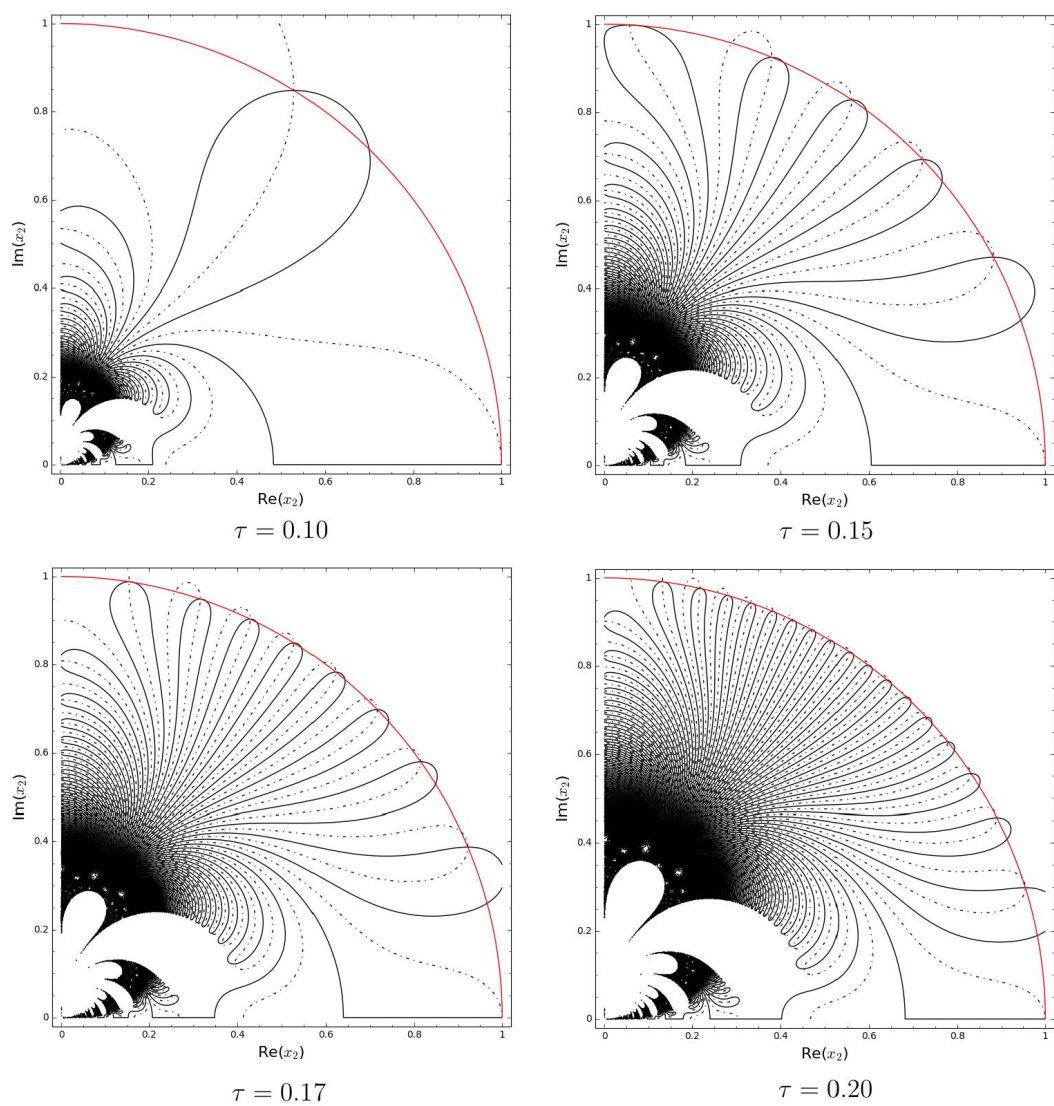


Figura 6.6: Curvas de nível de $f(x_2) = 0$, focadas nas raízes próximas à origem. A linha vermelha é o círculo, centrado na origem, de raio unitário.

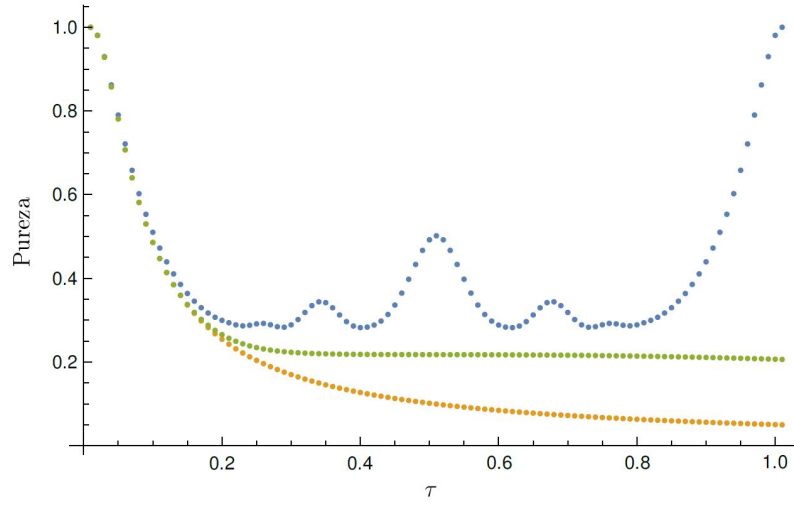


Figura 6.7: Pureza exata (azul), pureza semiclássica com apenas a trajetória trivial (laranja), e pureza com as contribuições do círculo unitário (verde). Utilizamos $|z_{0r}|^2 = E_{0r}/(\hbar\omega_r)$, $E_{0r} = \omega_r = \lambda = 1$, e $\hbar = 0.2\pi$.

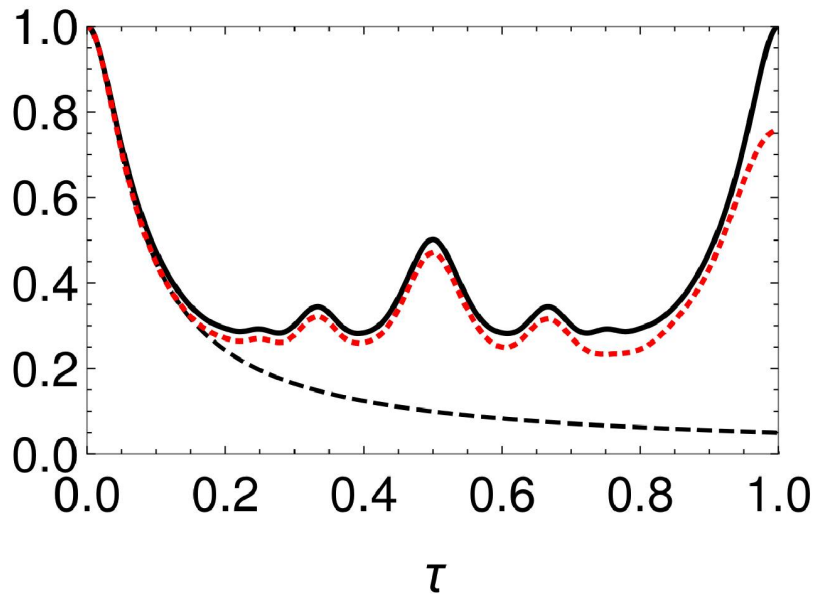


Figura 6.8: Pureza final. A linha contínua é o resultado exato, a linha tracejada é a pureza apenas com a trajetória trivial, e a linha pontilhada é o resultado com a inclusão de todas as trajetórias discutidas. Podemos ver que o método consegue reproduzir, inclusive, as oscilações da pureza (e, por consequência, da entropia linear).

Capítulo 7

Comentários finais

Nesta dissertação, apresentamos uma extensão da aproximação semiclássica descrita em [12]. Mostramos que há mais conjuntos de trajetórias contribuintes para a pureza semiclássica, ao contrário do que o artigo citado afirmava. Tais conjuntos possuem condições de contorno estendidas, obtidas em uníssono ao método do ponto de sela, de tal maneira que suas diversas componentes estão relacionadas entre si, de uma maneira não óbvia, fato este devido à extensão analítica das variáveis, inicialmente reais, para o plano complexo. Desta maneira, ao incluirmos outras trajetórias além da trajetória real, podemos, *a priori*, obter resultados mais satisfatórios para a pureza semiclássica, aproximando este valor com seu resultado quântico exato.

Esperávamos que tais contribuições fossem, à medida que as incluíssemos no cálculo da pureza, melhorando tal valor. Adicionando várias contribuições, fora do círculo unitário, os resultados obtidos para a pureza semiclássica não apenas obtiveram melhoras significantes, como conseguiram reproduzir as oscilações provenientes de efeitos de interferência, algo não esperado em um tratamento clássico. Gostaríamos de reforçar que o trabalho aqui apresentado envolve uma prescrição, deduzida rigorosamente da teoria, com condições de contorno obtidas ao utilizar o método dos declives mais íngremes, para identificar as trajetórias adicionais que devemos incluir. Estas condições de contorno dão origem a condições de contorno “emaranhadas”, que é diferente do método de dinâmica molecular com trajetórias emaranhadas visto em [28, 29], nas quais a dinâmica clássica é emaranhada devida à inclusão de um termo não-local nas equações de movimento, um procedimento similar à mecânica Bohmiana [20, 21]. Problemas atacados por este formalismo são típicos do campo da físico-química, nos quais a inclusão de correlações quânticas

chamaram bastante a atenção [30]. Esperamos que nosso trabalho possa contribuir para esta área, porém isto foge do escopo da presente dissertação.

Acreditamos que este trabalho ajude na interpretação dos mecanismos clássicos que geram emaranhamento. Assim, uma possível rota para trabalhos posteriores seria estudar outro(s) sistema(s) e analisar a dinâmica da pureza deste(s), assim como estender nossos resultados para estados com graus de liberdade de spin. Gostaríamos de aplicar o formalismo aqui presente para casos de desigualdade de Bell, no mesmo espírito de [31], uma vez que conseguimos reproduzir muito bem o comportamento da pureza quântica (e, por consequência, do emaranhamento) utilizando elementos clássicos. Nos perguntamos se esta prescrição viola tais desigualdades. No caso positivo, para ser consistente com o trabalho de Bell [32], elementos de não-localidade devem ser identificados no formalismo.

REFERÊNCIAS

- [1] B. R. R. Boaretto, R. C. Budzinski, T. L. Prado, J. Kurths, S. R. Lopes, *Supression of anomalous synchronization and nonstationary behavior of neural network under small-world topology*, Physica A **497**, 126 (2018).
- [2] R. C. Budzinski, B. R. R. Boaretto, T. L. Prado, S. R. Lopes, *Detection of nonstationary transition to synchronized states of a neural network using recurrence analyses*, Phys. Rev. E **96**, 012320 (2017).
- [3] M. C. Gutzwiller, *Chaos in classical and quantum mechanics*, editora Springer-Verlag (1990).
- [4] Matthias Brack e Rajat K. Bhaduri, *Semiclassical physics*, editora Westview Press (2003).
- [5] M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, editora Cambridge University Press (2000).
- [6] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki e K. Horodecki, *Quantum entanglement*, Rev. Mod. Phys. **81**, 865 (2009).
- [7] A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
- [8] K. Furuya e M. C. Nemes, *Quantum Dynamical Manifestation of Chaotic Behavior in the Process of Entanglement*, Phys. Rev. Lett. **80**, 5524 (1998).
- [9] R. M. Angelo, S. A. Vitiello, M. A. M. de Aguiar e K. Furuya, *Quantum linear mutual information and classical correlations in globally pure bipartite systems*, Physica A **338**, 458 (2004).

- [10] H. Han e P. Brumer, *Classical computation of decoherence dynamics in continuous variable systems*, J. Phys. B **40**, S209 (2007).
- [11] R. M. Angelo e K. Furuya, *Semiclassical limit of the entanglement in closed pure systems*, Phys. Rev. A **71**, 042321 (2005).
- [12] A. D. Ribeiro e R. M. Angelo, *Entanglement dynamics via coherent-state propagators*, Phys. Rev. A **82**, 052335 (2010).
- [13] Ph. Jacquod, *Semiclassical time evolution of the reduced density matrix and dynamically assisted generation of entanglement for bipartite quantum systems*, Phys. Rev. Lett **92**, 150403 (2004).
- [14] Ph. Jacquod e C. Petitjean, *Decoherence, entanglement and irreversibility in quantum dynamical systems with few degrees of freedom*, Adv. Phys. **58**, 67 (2009).
- [15] J. H. Van Vleck, *The correspondence principle in the statistical interpretation of quantum mechanics*, Proc. Natl Acad. Sci U.S.A. **14**, 178 (1928).
- [16] M. Baranger, M. A. M. de Aguiar, F. Keck, H. J. Korsch e B. Schelaaß *Semiclassical approximations in phase space with coherent states*, Journal of Physics A: Mathematical and General, **34**:7227, 2001.
- [17] Jean-Pierre Gazeau, *Coherent States in Quantum Physics*, editora Wiley-VCH (2009).
- [18] Herbert Goldstein, Charles P. Poole, John Safko, *Classical Mechanics*, 3ª Edição, editora Pearson.
- [19] Jerry B Marion, Stephen Thornton, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, 5ª Edição, editora Cengage Learning (2003).
- [20] D. Bohm, *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. I*, Phys. Rev. **85**, 166 (1952).
- [21] D. Bohm, *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. II*, Phys. Rev. **85**, 180 (1952).

- [22] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu e Franck Laloë, *Quantum Mechanics*, vol. 1, 1^a Edição, editora Wiley-VCH.
- [23] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Edição Revisada, editora Addison-Wesley Publishing Company (1994).
- [24] Norman Bleistein e Richard Handelsman, *Asymptotic Expansions of Integrals*, edição revisada, editora Dover Books (2010).
- [25] L. C. dos Santos e M. A. M. de Aguiar, *Coherent State Path Integrals in the Weyl Representation*, J. Phys. A **39**, 13465 (2006).
- [26] Alexandre Dias Ribeiro, *O Limite Semiclássico do Propagador em Estados Coerentes: o Papel das Trajetórias Complexas*, tese de Doutorado, orientado por M. A. M. Aguiar, Instituto de Física “Gleb Wataghin”, UNICAMP, 2004.
- [27] Peter Deuffhard, *Newton Methods for Nonlinear Problems: Affine Invariance and Adaptive Algorithms*, editora Springer (2011).
- [28] F. Xu, C. C. Martens, e Y. Zheng, *Entanglement dynamics with a trajectory-based formulation*, Phys. Rev. A **96**, 022138 (2017).
- [29] A. Donoso e C. C. Martens, *Quantum Tunneling Using Entangled Classical Trajectories*, Phys. Rev. Lett. **87**, 223202 (2001).
- [30] W. H. Miller, *Perspective: Quantum or classical coherence?*, J. Chem. Phys. **136**, 210901 (2012).
- [31] L. S. Silveira and R. M. Angelo, *Classical-hidden-variable description for entanglement dynamics of two-qubit pure states* Phys. Rev. A **95**, 062105.
- [32] J. S. Bell, *On the Einstein Podolski Rosen paradox*, Physics Vol. 1, No. 3, pg 195-200 (1964).